

فیزیک حالت جامد

(ویرایش دوم)

میدان مغناطیسی

اتم

گالیوم ارسناید (GaAs)

الکترون

آلومینیم گالیوم ارسناید (AlGaAs)

میدان مغناطیسی

اتم

تالیف: ج. آر. هوک
اچ. ای. هال

ترجمه: دکتر هادی اکبرزاده
دکتر علی اکبر بابایی
دکتر مهدی صفا

فیزیک حالت جامد

تألیف :

ج. آر. هوک

اچ. ای. هال

ترجمه :

دکتر هادی اکبرزاده

دکتر علی‌اکبر بابایی

دکتر مهدی صفا

روی جلد : اثر کوانتومی کسری هال

داستان آفرینش در ۲۰۰ کلمه گفته شد. اگر به من اعتقاد ندارید، آنرا اصلاح کنید

- ادگار والاس

پیشگفتار

هنگامی که زمان بررسی و ویرایش دوم کتاب فیزیک حالت جامد فرا رسید، احساس کردم که آنچه را باید در این مورد بگویم قبلاً در ویرایش اول گفته‌ام. همچنین احساس کردم که این کتاب برای بسیاری از دانشجویان بیش از حد طبیعی ویژه بود. به این دلایل، فکر کردم، اگر تجدید نظر و به تاریخ کردن کتاب به دست دیگری انجام‌پذیرد شایسته‌تر است، و ویراستاران نیز در این نظر سهیم بودند.

بنابراین به دکتر جان هوک، دوست و همکارمان برای سالهای زیاد، مراجعه کردیم و تصور می‌کنیم نتیجه کار، این تصمیم ما را تأیید می‌کند. به نظر من ویرایش جدید به صورت بهبود قابل ملاحظه‌ای از کتاب قدیمی است، ولی نوشتن همانند آن برای من رخ نداده است.

هنری هال

سپتامبر ۱۹۹۰

پیشگفتار مؤلف بر ویرایش دوم

اینجانب دعوت ویراستاران مجموعهٔ فیزیک منچستر برای نوشتن ویرایش دوم فیزیک حالت جامد را به دو دلیل اصلی پذیرفتم. نخست احساس کردم، با وجودی که رهیافت اتخاذ شده در ویرایش اول دارای بسیاری ویژگیها بود که باید آن را ستود، لیکن برای اینکه کتاب برای دانشجویان دوره کارشناسی بیشتر مورد استفاده باشد، برخی نظم دادنهای مجدد و ساده سازیهای مطالب لازم بود. دوم آنکه نیازی برای به حساب آوردن برخی پیشرفتهای مهم که از سال ۱۹۷۳ به بعد در فیزیک حالت جامد رخ داده‌اند احساس می‌شد.

برای منظم سازی مجدد و ساده‌سازی لازم بود که اکثر ویرایش اول بازنویسی شود. تغییری عمده برای ایدهٔ حالتهای الکترون متحرک در جامدها از طریق نظریهٔ الکترون آزاد فلزات به جای تشکیل نوارهای انرژی توسط همپوشی حالتهای اتمی روی اتمهای همسایه معرفی شده است. رهیافت دوم در ویرایش نخست به کار رفت زیرا می‌توان اول آن را در مورد گاز الکترونی رقیق در نیمرساناها که در آنها یک مدل ذره‌ای مستقل مورد انتظار است، به‌کار برد. با وجودی که این مورد تقاضای فیزیکدانان مجرب بود، برای دانشجویان دورهٔ کارشناسی، که باید بسیاری از ایده‌های جدید را در آغاز تلفیق کنند، مشکل بود. یک ویژگی ویرایش نخست که من آن را حفظ کرده‌ام این است که تا حد امکان بحث رسمی در مورد شبکهٔ وارون و مناطق بریلوئن در یک بلور سه بعدی را به تأخیر انداختم. هر چند این مفاهیم یک چارچوب کلی کار برای توصیف بسیاری از خواص جامدهای بلورین را فراهم می‌سازند، مانند معادلات ماکسول در الکترومغناطیس لیکن محتملتر است که دانشجویانی که قبلاً با برخی از این ایده‌ها به صورت مفهومی ساده‌تر روبرو شده‌اند قدر این مطالب را بهتر بدانند. با استفاده از هندسه‌های یک و دو بعدی در صورت لزوم ازکاربرد چارچوب رسمی در فصلهای آغاز اجتناب گردیده است.

برای به حساب آوردن پیشرفتهای اخیر، مطالب مربوط به فیزیک قطعات نیمرسانا به اندازهٔ قابل ملاحظه‌ای افزایش یافته است، یک فصل در بارهٔ گاز الکترون دو بعدی و اثر کوانتومی هال افزوده شده است، و بخش‌هایی در بارهٔ شبه بلورها، ابررساناهای گرم و استفاده از الکترونها در کاوش سطوح اضافه شده‌اند. یک فصل نیز در مورد خواص الکتریکی عایقها افزوده شده است.

سعی کرده‌ام با تولید کتابی با حجم منطقی (و بنابراین با قیمت مناسب) از هدف مجموعهٔ

کتابهای فیزیک منچستر پیروی کنم تا امکان تعریف دروس کارشناسی جامع با حجم و سختی متفاوت امکانپذیر باشد. در این زمینه مشکل مربوط به فیزیک حالت جامد، آن است که شامل سرفصلها و عناوین گوناگون است، در نتیجه دوره‌های درسی کاملاً متفاوت امکانپذیر است. بنابراین در انتخاب موضوعهایم مجبور بوده‌ام که خیلی گزینشی عمل کنم و این شدیداً تحت تأثیر فیزیک حالت جامد سال سوم کارشناسی در دانشگاه منچستر قرار گرفته است. ما معمولاً یک درس پایهٔ ۲۰ جلسه‌ای داریم که در دو سطح ارائه می‌شود. این دروس شامل مطالب از فصل ۱ تا ۵ این کتاب است و درس سطح بالاتر، بخشهای مناسبی از فصلهای ۱۱ تا ۱۳ را نیز در بر می‌گیرد یک درس ۲۰ جلسه‌ای دیگر در بارهٔ موضوعهای برگزیده در فیزیک حالت جامد معمولاً شامل مغناطیس، ابررسانایی و فروالکتریسیته (فصلهای ۷ تا ۱۰) می‌شود. نمودار جریان درس در ابتدای کتاب را می‌توان به منزلهٔ کمکی در طرح دروس بر مبنای این کتاب به کار برد.

مطالب مهم که این کتاب در بر ندارد، عبارت از کاستیهای بلوری و جامدهای نامنظم‌اند. من علاقمند بودم که فصلی در مورد هر یک از این موضوعها اضافه کنم ولی با توجه به اینکه از حدی که توسط، ناشرین و ویراستاران تعیین شده بود تجاوز می‌کرد، چنین ننمودم.

این کتاب، مانند ویرایش اول، یک دانش زمینه در موارد زیر را به صورت پیش نیاز فرض می‌کند: خواص ماده (پتانسیلهای بین اتمی و رابطهٔ آنها با انرژی پیوند و مدولهای کشسانی، نظریه جنبشی)، مکانیک کوانتومی (معادلهٔ و جواب آن برای یافتن ویژه تابعها)، الکتریسیته و مغناطیس (معادلات ماکسول و آشنایی با میدانهای الکتریکی و مغناطیسی در ماده) و فیزیک گرما (عامل بولتزمن و توزیعهای فرمی وبوز). کتابهایی که در آنها این آگاهی زمینه را می‌توان یافت، همراه با کتابهای مرجع عمومی برگزیده در بارهٔ فیزیک حالت جامد و برخی کتابها و مقالات که اطلاعات بیشتر در مورد موضوعهای ویژه ارائه می‌دهند در کتابشناسی فهرست شده‌اند.

این کتاب شامل برخی مطالب پیشرفته و جامع دیگر است، که بدون از دست دادن پیوستگی می‌توانند حذف شوند. بخشهای کامل از این مقوله با ستاره مشخص شده‌اند.

استفاده از حروف پررنگ برای یک واژهٔ تکنیکی در متن، معمولاً وقتی است که با واژه برای اولین بار روبرو می‌شویم و نشانگر آن است که تعریفی یا شرحی از واژه را آنجا می‌توان یافت. در برخی موارد نیز برای تأکید از حروف پررنگ استفاده شده است.

از دیوید ساندی فورد و هنری هال برای راهنمایی و انتقاد سازندهٔ بسیار سپاسگزارم. همچنین از کالین لالی دانشجوی منچستر که متن را از دیدگاه یک مصرف کنندهٔ آینده مطالعه کرد تشکر می‌کنم؛ واکنش او مرا مطمئن ساخت که سطح کتاب مناسب است. کارهای طراحی و عکاسی ایان کالاهان در تولید بسیاری از شکلها بسیار ارزشمند بود، و پسرم جیمز با علاقه در کارهای تهیهٔ دستخطها مرا کمک نمود.

جان هوک

سپتامبر ۱۹۹۰

پیشگفتار ویراستاران در مورد مجموعه فیزیک منچستر

اولین کتاب از مجموعهٔ فیزیک منچستر در سال ۱۹۷۰ منتشر شد، و بعد از آن کتابهای دیگری نیز به آن افزوده شده‌اند که تا به حال بالغ بر ربع میلیون جلد از کتابها به زبان انگلیسی یا ترجمه آنها از این مجموعه در سرتاسر جهان به فروش رفته‌اند. واکنش خوانندگان، اعم از همکاران و دانشجویان، برای ما بسیار دلگرم کننده بوده است. کتابها چندین نوبت تجدید چاپ، و بعضی از عناوین در چاپ جدید بازنویسی شده‌اند تا نقطه نظرات دریافتی از خوانندگان را اعمال و تغییر روش و نیازهای درسهای دورهٔ کارشناسی را منعکس نمایند.

مجموعهٔ فیزیک منچستر مجموعه‌ای از کتابهای مرجع در رده کارشناسی است. این مجموعه حاصل تجربیات ما در بخش فیزیک دانشگاه منچستر، با مشارکت گسترده جاهای دیگر، و به گونه‌ای است که مطالب بسیاری از کتابها بسیار بیشتر از آن است که در یک درس کارشناسی جای گیرد و این مطالب گاهی طوری تنظیم شده‌اند که می‌توان یک درس مستقل کوتاه‌تری را تعریف کرد. ما از تدوین این کتابها دو هدف داشته‌ایم. یکی آنکه کتابهای کوتاه تولید کنیم: به گونه‌ای که مدرسین آنها را برای درسهای کارشناسی جذاب بیابند؛ دانشجویان از اندازه دایرالمعارف گونه و یا قیمت آنها نهراسند. برای نیل به این هدف، در انتخاب سرفصلها بسیار گزینشی عمل کرده‌ایم، بر مبانی فیزیک همراه با کاربردهایی سازنده، مشوق و مفید تأکید داشته‌ایم. هدف دوم ما تولید کتابهایی بود که امکان درسهای با کمیت غیریکسان مطالب و با تأکید بر کاربردهای متفاوت را فراهم نماید. برای نیل به چنین میزانی از انعطاف پذیری، مؤلفین را تشویق کرده‌ایم که با به کار بردن نمودار جریان، ارتباط منطقی بین فصلها را نمایش و تعدادی از عناوین را در بخش ستاره‌دار قرار دهند. این بخشها در برگیرنده مطالب پیشرفته‌تر و قابل جایگزین است که برای فهم قسمتهای بعدی کتاب مورد نیاز نیست. این کتابها گرچه به عنوان یک مجموعه طراحی شده‌اند، لیکن هر یک از آنها مستقل است و می‌تواند بدون نیاز به کتابهای دیگر به کار رود. تعدادی از آنها برای کاربردهای گسترده‌تر در دیگر علوم مناسب هستند.

پیشگفتار هر مؤلف اطلاعات تفصیلی در مورد سطح علمی کتاب، پیشنیاز و غیره را ارایه می‌کند.

ما از انبوه دانشجویان و همکاران، در منچستر و جاهای دیگر، که انتقادهای مفید و اظهارنظرهای مشوق ایشان به اصلاحات زیادی منجر شده است عمیقاً قدردانی می‌کنیم. از مؤلفین به خاطر همهٔ آن چیزی که انجام داده‌اند، ایده‌های جدید فراوانی که عرضه کردند، و بحثهای صبورانه‌ای که انجام دادند، برای پذیرش غالب پیشنهادها و درخواستهای فراوان ما صمیمانه سپاسگزاریم. همچنین مایلیم از ناشر، جان وایلی و پسران، به خاطر همکاری فراوان ایشان، تشکر کنیم.

الف - ماندل
ار- جی-الیسون
دی - جی- ساندی‌فورد

ژانویه ۱۹۸۷

به نام خدا

پیشگفتار مترجمین

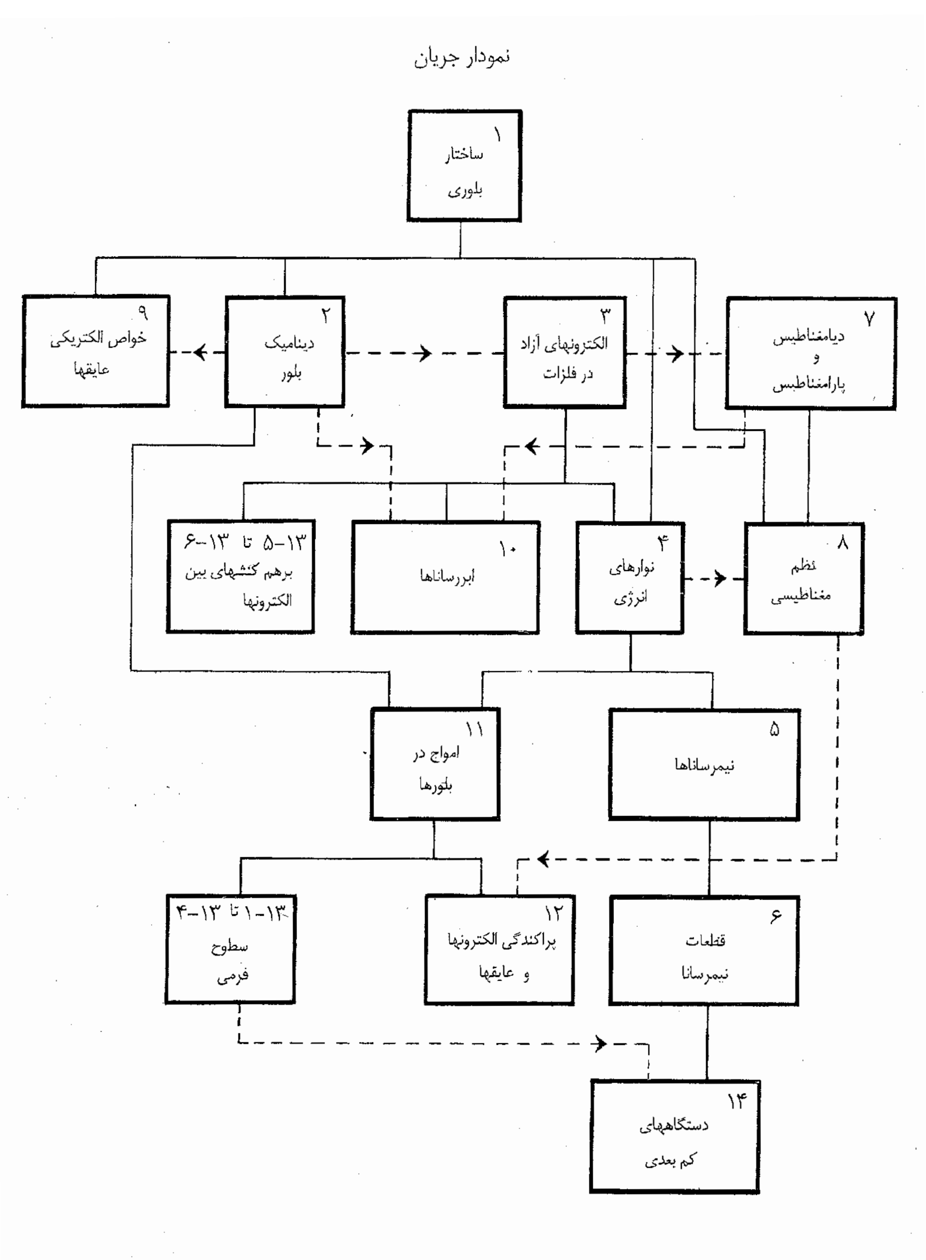
مادهٔ چگال گرچه بزرگترین زیر شاخهٔ فیزیک است و بیشترین سهم را چه به لحاظ گستردگی و تنوع مباحث و چه از نظر فراوانی پژوهشگران بر عهده دارد، لیکن هنوز کتابهای فارسی به تعداد کافی در این زمینه در دسترس علاقمندان قرار ندارد. این کمبود تا به آن حد جدی است که بسیاری از دانشجویان علاقمند به مباحث مادهٔ چگال به ویژه در ردهٔ کارشناسی قادر نیستند با مراجعه به منابع فارسی، برای انبوه سؤالهای علمی خود، پاسخهای کامل و همه جانبه‌ای را دریافت کنند. وجود چنین کمبودی ما را بر آن داشت تا به ترجمهٔ این کتاب مبادرت ورزیم.

ویرایش دوم کتاب **فیزیک حالت جامد** که ما به ترجمهٔ آن پرداختیم کتاب ارزشمندی است که مؤلفین توانمند آن **هنری هال و جان هوک** توانسته‌اند ماهرانه مفاهیم عمیق علمی را به زبان شیوا و در عین حال دقیق توضیح دهند. این کتاب مانند دیگر کتابهای مجموعهٔ فیزیک منچستر از پشتوانهٔ ارزشمند به کارگیری چندین ساله در بخش فیزیک دانشگاه منچستر به عنوان کتاب درسی برخوردار است، بنابراین از سازوکار حک و اصلاح تدریجی بهره برده است. لذا امیدواریم ترجمهٔ آن گام کوچکی در جهت دسترسی سهل‌تر دانشجویان به مفاهیم فیزیک مادّه چگال باشد و مورد پذیرش فیزیک پیشگان کشور قرار گیرد.

در پایان از همکار محترم سرکار خانم دکتر اعظم پورقاضی به خاطر ویرایش کتاب صمیمانه تشکر می‌کنیم و وظیفهٔ خود می‌دانیم که از مدیریت محترم و کارکنان مرکز نشر دانشگاه صنعتی اصفهان به ویژه سرکارخانم زحل شیروانی و جناب آقای ناصر مجاهد تشکر و قدردانی نماییم. از کلیهٔ همکاران و دانشجویان عزیز صمیمانه تقاضا می‌کنیم ما را از نظرهای ارزشمند خود بهره‌مند سازند.

هادی اکبرزاده **علی‌اکبر بابایی** **مهدی صفا**

آذرماه ۱۳۷۹



خطوط پیوسته پیشنیازهای لازم را نشان می دهند.

پیکانهای خط چین اتخاذ برخی مطالب از فصل قبل را نشان می دهد.

فهرست مطالب

فصل اول : ساختاری بلوری

فصل دوم : دینامیک بلور

فصل سوم : الکترون آزاد در فلزات

فصل چهارم : اثر پتانسیل دوره‌ای شبکه - نوارهای انرژی

فصل پنجم : نیمرسانا

فصل ششم : قطعات نیمرسانا

فصل هفتم : دیا مغناطیسی و پارامغناطیسی

فصل هشتم : نظم مغناطیسی

فصل نهم : خواص الکتریکی عایق‌ها

فصل دهم : ابررسانایی

فصل یازدهم : امواج در بلورها

فصل دوازدهم : پراکندگی نوترونها و الکترونها از جامدها

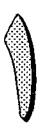
فصل سیزدهم : فلزات واقعی

فصل چهاردهم: دستگاههای کم بعدی

پیوستها

زیباترین زیور زیبایی بی‌زیوری است

فینا فلشر (۱۶۵۰-۱۵۸۲) *



ساختار بلوری

۱-۱ مقدمه

هدف فیزیک حالت جامد توضیح خواص مواد جامدی است که بر روی زمین یافت می‌شوند. تقریباً در تمام موارد انتظار می‌رود که این خواص از معادلهٔ شرودنیگر، برای مجموعه‌ای از هسته‌های اتمی و الکترونها که به وسیلهٔ نیروهای الکتروستاتیکی بر هم کنش می‌کنند، پیروی نمایند. بنابراین قوانین بنیادی حاکم بر رفتار جامدها شناخته و به خوبی آزموده شده‌اند. امروزه قوانین بنیادی تنها درکیهانشناسی، اختر فیزیک و فیزیک انرژی - بالا مورد شک و تردیدند.

در این کتاب تقریباً همواره جامدهای بلورین، یعنی جامدهایی که ساختاری مبتنی بر یک نقشه تکراری مرتب، مانند کاغذ دیواری سه بعدی، دارند مورد نظر خواهند بود. بسیاری از جامدهای مهم به این معنا بلورین هستند، هر چند که این خاصیت در شکل خارجی آنها همواره آشکار نیست، ولی در درک رفتار مواد بلورین به لحاظ آسانتر بودن محاسبات نسبت به مواد غیر بلورین پیشرفت بیشتری به عمل آمده است. بسیاری از جامدهای متداول - مانند شیشه، پلاستیک‌ها، چوب و استخوان - در مقیاس اتمی چندان منظم نیستند و بنابراین غیر بلورین‌اند. فقط در زمینهٔ فهم رفتار جامدهای غیر بلورین، در سطح بنیادی ، تنها همین اواخر پیشرفتهایی حاصل شده است**.

حتی در زمینهٔ محدود جامدهای بلورین، تنوع زیادی که در رفتار کیفی متفاوت وجود دارد

---

*-*Phineas Fletcher*

** مجلهٔ *Phgsics Today* ماه دسامبر ۱۹۸۸، شامل مقالاتی است که برخی از پیشرفتهای مربوط به فهم مواد نامنظم را مطرح می‌کنند.

بسیار چشمگیر است. عایقها، نیمرساناها، فلزات و ابررساناها را داریم که از قوانین متفاوت ماکروسکوپی پیروی می‌کنند: میدان الکتریکی، در عایق گشتاور دو قطبی به وجود می‌آورد (فصل ۹)، در فلز یا نیمرسانا، جریان پاینده‌ای پدید می‌آورد (فصل ۳ تا ۶) و در ابررسانا جریانی با شتاب پاینده را باعث می‌شود (فصل ۱۰). جامدها می‌توانند شفاف یا کدر، سخت یا نرم شکننده یا چکش خوار، مغناطیسی یا غیرمغناطیس باشند.

در این فصل، نخست در قسمت ۱-۲، به معرفی ایده‌های اساسی بلورشناسی می‌پردازیم. در قسمت ۱-۳ برخی ساختارهای بلوری مهم را توصیف می‌کنیم و در قسمت ۱-۴ چگونگی کاربرد پراش پرتوهای X در تعیین ساختار بلورین را شرح خواهیم داد. در قسمت ۱-۵ در مورد شبه بلورها، یا جامدهای منظمی که دانش سنتی مربوط به مواد بلورین را به چالش می‌گیرند بحث خواهیم کرد. توصیف کیفی نیروهای بین اتمی که مسئول پیوند اتمها در جامدها هستند در قسمت ۱-۶ ارائه می‌شود.

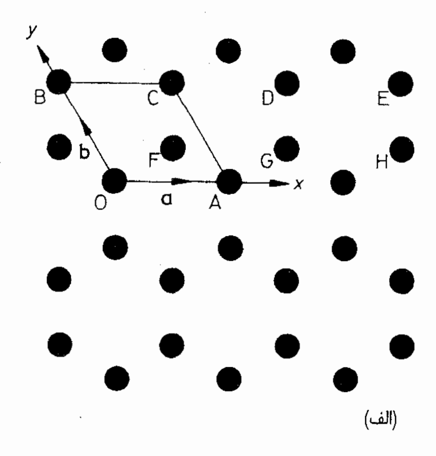
۱-۲ مبانی بلورشناسی

آگاهی بنیادی از بلور شناسی برای فیزیکدانان حالت جامد ضروری است و آنها باید بدانند هر ساختار بلوری را چگونه به طور کامل، دقیق و بدون ابهام مشخص کنند، و باید از روش طبقه‌بندی ساختارها در انواع گوناگون براساس تقارنهایشان آگاهی داشته باشند؛ خواهیم دید که تقارن یک بلور می‌تواند تأثیر زیادی بر خواص آن داشته باشد. خوشبختانه در این کتاب تنها ساختارهای ساده را مورد توجه قرار خواهیم داد و بنابراین می‌توانیم از روشهای نظریهٔ گروه، که عموماً برای بحث در مورد ساختارهای بلوری لازم است، اجتناب کنیم.

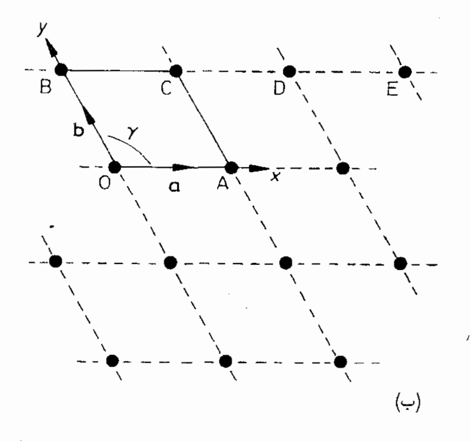
۱-۲-۱ شبکه بلوری

با یک مثال ساده روشها و علائم اختصاری راکه بلورشناسان برای توصیف ساختار بلورها به کار می‌برند نمایش می‌دهیم. گرافیت یک شکل بلورین کربن است که در آن آرایه‌های شش گوشی از اتمها بر روی رشته‌ای از صفحات موازی هم فاصله قرار دارند. ترتیب اتمها بر روی یکی از این صفحات در شکل ۱-۱ (الف) نشان داده شده است. گرافیت را از آن رو به عنوان مثال برمی‌گزینیم که یک تک صفحهٔ دو بعدی از اتمها در این ساختار، اکثر مفاهیمی راکه مورد نیازند نمایش می‌دهد. فیزیکدانان حالت جامد به هنگام رویارویی با یک مسئلهٔ جدید، اغلب به شیوهٔ نگرش به یک دستگاه در یک یا دو بعد متوسل می‌شوند؛ فیزیک مسئله اغلب (ولی نه **همیشه**) مانند حالت سه بعدی است ولی ریاضیات و درک آن می‌تواند به مراتب ساده‌تر باشد.

برای توصیف ساختار بلور گرافیت دو بعدی لازم است مجموعه‌ای از محورهای مختصات در بلور بنا کنیم. مبداء مختصات را می‌توان در اصل در هر جایی در نظر گرفت، ولی معمولاً آن را



(الف)



(ب)

شکل ۱-۱: بلور دو بعدی از اتمهای کربن در گرافیت: (الف) نشان می‌دهد که چگونه اتمها در گوشه‌های شش ضلعی منظم قرار گرفته‌اند؛ (ب) شبکهٔ بلوری حاصل از شناسایی تمام اتمهای شکل (الف) در موقعیت‌هایی یکسان با اتم واقع در O قرار دارند. محورهای بلور، بردارهای شبکه و یاختهٔ یکّهٔ قرار دادی در هر دو شکل نشان داده شده‌اند.

روی یکی از اتمها در نظر می‌گیرند. فرض کنید که اتم O ، در شکل ۱-۱ (الف)، را به منزلهٔ مبداء برگزینیم. گام بعدی، گام بسیار مهمی است؛ باید تمام مکانهای درون بلور را که از هر نظر با مبداء یکسان هستند شناسایی کنیم. شرط لازم برای یکسان بودن آن است که ناظر واقع در هر یک از این مکانها، در هر جهت همان منظره‌ای را مشاهده کند که ناظر واقع در مبداء مشاهده می‌کند. واضح است برای اینکه این موضوع امکانپذیر باشد، باید تصور کنیم که بلور دو بعدی تا بینهایت گسترش دارد. خواننده باید خود را متقاعد سازد که اتمهای واقع در A، B، C، D و E (و هشت اتم دیگر در شکل) همانند اتم واقع در مبداءاند ولی اتمهای واقع در F، G و H چنین نیستند؛ برای مثال جهتهای سه نزدیکترین همسایه‌های اتم واقع در O را با جهت‌های سه نزدیکترین همسایهٔ مربوط به اتم واقع در F مقایسه کنید. مجموعهٔ نقاط یکسانی که به این طریق مشخص می‌شوند در شکل ۱-۱ (ب) نشان داده شده است و **شبکهٔ بلور** نام دارد؛ مقایسهٔ شکلهای ۱-۱ (الف) و (ب) به وضوح نشان می‌دهد که شبکه عموماً همانند ساختار نیست.

خواننده باید خود را متقاعد کند که، سوای یک انتقال بی‌اهمیت در مکان، شبکه مستقل از انتخاب مبداء است. با مشخص کردن شبکهٔ بلوری به این روش، محورهای مختصات به آسانی با وصل کردن نقطهٔ شبکهٔ واقع در مبداء به دو همسایه‌اش به دست می‌آیند.

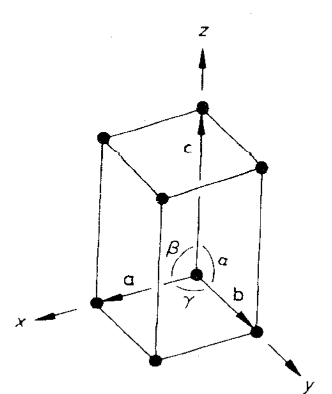
راههای بسیاری برای انجام این کار وجود دارد، ولی گزینهٔ قراردادی برای گرافیت آن است که، همان گونه که در شکل ۱-۱ (ب) نشان داده شده است، OA و OB را برای محورهای x و y اختیار کنیم. نمونهٔ یک گزینهٔ غیرمتداول محورهای مختصات برای گرافیت آن است که OA را، مانند قبل، برای محور x بگیریم ولی جهت OD را برای محور y اختیار کنیم. فاصله‌ها و جهت‌های نزدیکترین نقاط شبکه، در امتداد محورهای x و y به ترتیب، به وسیلهٔ بردارهای شبکهٔ **a** و **b** مشخص می‌شوند. [شکل ۱-۱(ب)] . شبکهٔ بلوری با دادن طولهای **a** , **b** و زاویهٔ γ ی بین آنها کاملاً مشخص می‌شود. برای گرافیت داریم $a=b=$ ۲/۴۶ Å و $\gamma=$ ۱۲۰° (۱ آنگستروم ۱ = ۱Å $=$ ۱۰^{-۱۰}m). بنابراین، گزینهٔ قرار دادی محورها برای گرافیت تقارن شش گوشی این ساختار را به وضوح نشان می‌دهد؛ گزینهٔ غیر قرار دادی که در بالا بحث شد این خصوصیت را ندارد.

به قرار زیر، با رسم تمام بردارهای ممکن از مبدأ به مکان تمام نقاط شبکهٔ دو بعدی بلور گرافیت می‌رسیم.

$$\mathbf{r}=u\mathbf{a}+\nu\mathbf{b} \tag{۱-۱}$$

که در آن u و ν تمام اعداد صحیح ممکن، مثبت، منفی و صفر را اختیار می‌کنند. این نکته که بلور از تمامی مکانهایی که توسط این معادله داده می‌شود یکسان به نظر می‌رسد، نشانهٔ آن است که بلور دارای خاصیت مهم **ناوردایی انتقالی** است.

تعمیم مفاهیم بالا به بلور سه بعدی کار آسانی است. یک مبداء انتخاب می‌شود و تمام نقاط درون بلور، که با آن یکسان هستند، شناسایی می‌شوند؛ این مجموعهٔ نقاط، یک شبکه بلوری سه بعدی را می‌سازند. سپس با وصل کردن نقطهٔ شبکهٔ واقع در مبداء به **سه** همسایهٔ نزدیکش جهت‌های محورهای مختصات بلور تعریف می‌شوند (شکل ۱-۲). انتخاب همسایه‌ها اغلب



شکل ۱-۲: محورهای بلورشناسی و یاختهٔ یکّه برای یک شبکهٔ بلور سه بعدی.

بدیهی است ولی، جایی که چنین نباشد، بنا به قرارداد آنهایی برگزیده می‌شوند که بیشترین تقارن بلور را نشان می‌دهند. فاصله‌ها و جهت‌های نزدیکترین نقاط شبکه در راستای محورهای بلورشناسی x، yو z توسط **سه** بردار شبکهٔ **a**، **b** و **c** مشخص می‌شوند. با معلوم بودن طولهای **a**، **b** و **c** و زاویه‌های بین آنها، α، β و γ، شبکه به طور کامل مشخص می‌شود (شکل ۱-۲).
با رسم تمام بردارهای ممکن، **r**، به قرار زیر از مبداء به مکان تمام نقاط شبکه می‌رسیم

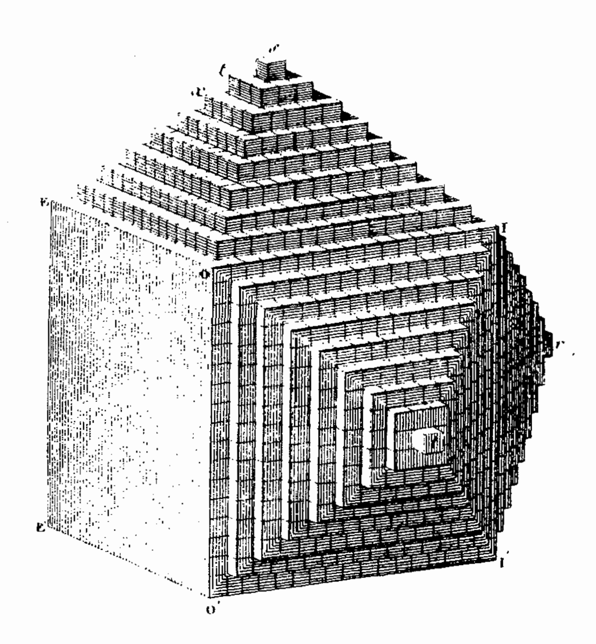
$$\mathbf{r}=u\,\mathbf{a}+v\mathbf{b}+w\mathbf{c}$$ **(۱-۲)** (u، v و w اعداد درستند)

قابلیت توصیف مکان نقاط به این طریق، همراه با یک گزینش مناسب از **a**، **b** و **c** را می‌توان به منزلهٔ تعریف یک شبکه در بلورشناسی در نظر گرفت. مادهٔ بلورین را می‌توان ماده‌ای تعریف کرد که دارای شبکه‌ای از این نوع باشد؛ خاصیت ناوردائی انتقالی بلور آن است که بلور از تمامی مکانهایی که به وسیلهٔ (۱-۲) داده می‌شوند یکسان به نظر می‌رسد. توجه کنید که تنها اثر انتقال مبداء در یک شبکهٔ بلوری به صورت انتقال شبکه به طور یکجا به همان مقدار است.

بردارهای شبکه، **یاختهٔ یکّهٔ** بلور را نیز تعریف می‌کنند. با بازگشت به بلور گرافیت دو بعدی، شکل ۱-۱، که در آن یاختهٔ یکّهٔ بلورگرافیت متوازی الاضلاع OACB است که توسط بردارهای **a** و **b** تعریف می‌شود، این مفهوم به آسانترین نحو بیان می‌شود. این یاخته را یکّه می‌نامند. زیرا از تکرار آن، همان طور که در شکل ۱-۱ (ب) با خط چین نشان داده شده است. شبکه بلوری کامل تولید می‌شود.
مانستهٔ سه بعدی آن در شکل ۱-۲ نشان داده شده است و با بردارهای **a**، **b** و **c** تعریف می‌شود و یک متوازی السطوح است و یاختهٔ یکّهٔ این شبکهٔ سه بعدی است. یاختهٔ یکّهٔ حاصل از گزینش بردارهای شبکهٔ قرار دادی به یاختهٔ یکّهٔ قراردادی مشهور است.

مفهوم یاختهٔ یکّه، به منزله سنگ بنا، امکان درک شباهت‌های قابل ملاحظه‌ای در بلورهای متفاوت از یک ماده را فراهم می‌سازد. به ویژه می‌توانیم قانون ثابت بودن زاویه را توضیح دهیم (این قانون نخست توسط نیکلاس استنو در سال ۱۷۶۱ بیان شد). طبق این قانون ***در تمامی بلورهای یک جسم زوایای بین وجوه متناظر مقداری ثابت است.*** شکل ۱-۳ تصویری از یک کتاب قدیمی کانی شناسی است و نشان می‌دهد که چگونه می‌توان با استفاده از یاخته‌های یکّهٔ مکعبی به منزلهٔ سنگ بنا وجوه تخت ماکروسکوپی در سمت گیری‌های متفاوت بنا کرد. در فصل ۱۲ خواهیم دید که سطوح بلورها در واقع به روشی که در این تصویر پیشنهاد شده است بنا نمی‌شوند.

خواننده در خواهد یافت که شبکهٔ دو بعدی گرافیت [شکل ۱-۱ (ب)] علاوه بر ناوردایی انتقالی که توسط معادلهٔ (۱-۱) بیان شده است خواص تقارنی دیگری نیز دارد. برای مثال، این شبکه با یک دوران $60°$، حول محوری که از یک نقطهٔ شبکه می‌گذرد و بر صفحه xy عمود است،



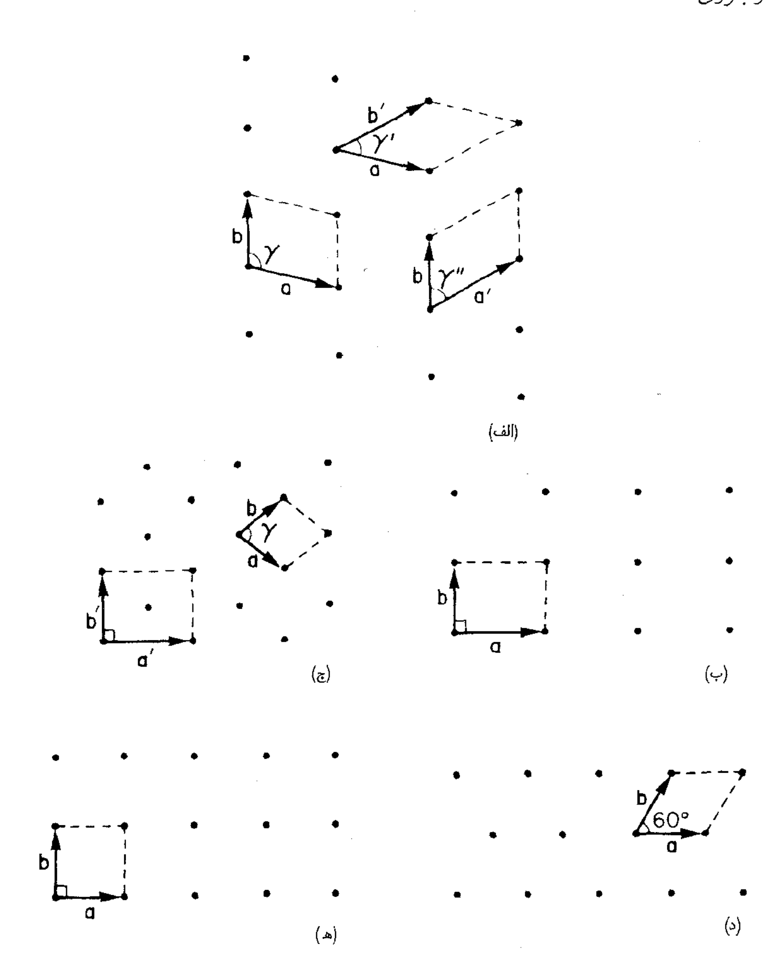
شکل ۱-۳: روشی که در آن، با انباشتن یاخته‌های یکهٔ مکعبی، می‌توان وجوه بلوری، با سمت گیریهای متفاوت را تولید کرد*

به خود بر می‌گردد؛ این محور، محور بلورشناسی z گرافیت است، که به این ترتیب یک محور دوران شش تایهٔ شبکه است. براوه[1] در سال ۱۸۴۵/۱۲۲۴ استخراج کرد که هر شبکهٔ سه بعدی به شکل معادلهٔ (۱-۲) را می‌توان، بنابر تقارنی که دارد، به صورت یکی از ۱۴ نوع ممکن طبقه‌بندی کرد. ۱۴ **شبکهٔ براوه** فقط محورهای دوران یک، دو، سه، چهار و شش تایه دارند.

در اینجا تمام ۱۴ شبکهٔ براوه را توصیف نخواهیم کرد، زیرا فقط چند شبکهٔ براوه در این کتاب مطرح خواهند شد. ولی برای نمایش دادن اصل طبقه‌بندی شبکه‌ها به وسیلهٔ تقارن، مسئلهٔ دو بعدی متناظر را بررسی می‌کنیم. یک شبکه که تقارن آن فقط با $\mathbf{a}$، $\mathbf{b}$ و زاویهٔ γی بین $\mathbf{a}$ و $\mathbf{b}$ مشخص می‌شود. یک شبکهٔ با تقارن انتقالی با ۳ انتخاب ممکن یاختهٔ یکّهٔ بسیط در شکل ۱-۴ (الف) نشان داده شده است. شبکه‌های با تقارن بالاتر در شکلهای ۱-۴ (ب) تا (هـ) نشان داده شده‌اند. در **شبکهٔ مستطیلی** شکل ۱-۴ (ب)، $\gamma = 90^\circ$. مثال دیگر، **شبکه لوزی** با یک مقدار عمومی γ و $a=b$ است، که در شکل ۱-۴ (ج) نمایش داده شده است. مثال آخر جالب توجه است، زیرا با شبکهٔ مستطیلی در برخی تقارنها اشتراک دارد و آنرا با یاختهٔ یکّهٔ مستطیلی که توسط $\mathbf{a'}$ و $\mathbf{b'}$ تعریف می‌شود، می‌توان توصیف کرد. این یاختهٔ یکّه مستطیلی علاوه بر

*- Hauy. Tvait, de Crystallographie

۱- Bravais



شکل ۱-۴: پنج نوع شبکهٔ بلوری دو بعدی ممکن (الف) شبکه‌ای که فقط تقارن انتقالی دارد، سه یاختهٔ یکّه بسیط نشان داده شده است. (ب) شبکهٔ مستطیلی، $\gamma = ۹۰^\circ$، (ج) شبکهٔ لوزی $a=b$، معادل شبکهٔ مستطیلی مرکزدار با یاختهٔ یکّهٔ نابسیط که توسط $\mathbf{a'}$ و $\mathbf{b'}$ تعریف می‌شود (د) شبکهٔ سه گوش، $a=b$ و $\gamma = ۶۰^\circ$ (هـ) شبکهٔ مربعی $a=b$ و $\gamma = ۹۰^\circ$.

گوشه‌ها یک نقطهٔ شبکهٔ نیز در مرکز دارد و بنابراین **شبکهٔ لوزی شبکهٔ مستطیلی مرکز دار** نیز خوانده می‌شود. مساحت یاختهٔ یکّه تعریف شده توسط $\mathbf{a'}$ و $\mathbf{b'}$ دو برابر مساحت یاختهٔ یکّهٔ تعریف شده توسط $\mathbf{a}$ و $\mathbf{b}$ است. یاختهٔ یکّهٔ روی $\mathbf{a}$ و $\mathbf{b}$ کوچکترین یاختهٔ یکّهٔ ممکن این شبکه است و از این رو **یاختهٔ یکّهٔ بسیط** نامیده می‌شود، در نتیجه یاختهٔ دیگر یک **یاختهٔ یکّهٔ نابسیط** است. در بخش ۱-۳ با نمونه‌هایی از هر دو نوع یاختهٔ یکّهٔ بسیط و نابسیط مواجه خواهیم شد.

برای تکمیل فهرست شبکه‌های دو بعدی باید امکان $a=b$ همراه با مقدارهای خاصی از γ را در نظر بگیریم. دو مورد وجود دارد: $\gamma=60^\circ$ (یا 120°) **شبکهٔ سه‌گوش** شکل ۱-۴ (د) را می‌دهد که در آن هر نقطه شبکه با شش همسایه درگوشه‌های یک شش ضلعی منظم احاطه شده است؛ و $\gamma=90^\circ$ **شبکهٔ مربعی** شکل ۱-۴ (هـ) را می‌دهد. شبکهٔ دو بعدی گرافیت در شکل ۱-۱(ب) یک شبکهٔ سه گوش است.

۱-۲-۲ پایه

پس از تعیین شبکه بلور، با استفاده از روشی که در قسمت قبل توصیف شد و استفاده از آن برای شناسایی محورهای مختصات مناسب و یاختهٔ یکه توصیف ساختار بلوری با مشخص کردن محتوای یاختهٔ یکّهٔ تکمیل می‌شود. این کار عبارت است از شناسایی گروه اتمهایی که وقتی با همهٔ نقاط شبکه‌ای وابسته می‌شوند ساختار را به طور کامل تولید می‌کنند. این گروه اتمها به **پایهٔ** ساختار مشهور است. پایه با معلوم کردن مکان و نوع شیمیایی تمام اتمهایی درون آن مشخص می‌شود. برای نمایش روش کار بار دیگر ساختار گرافیت دو بعدی شکل ۱-۱ (الف) را به کار می‌بریم. یاختهٔ یکّهٔ $OACB$ در این ساختار، اتم F را در بردارد و خواننده باید خود را متقاعد کند که می‌توان با مربوط ساختن اتمهای کربن در O و F به نقطهٔ شبکهٔ واقع در O، انتخابی مناسب (ولی نه یکتا) برای پایهٔ بلور گرافیت در دو بعد به دست آورد. زیرا با وابسته کردن زوج اتمهای متناظر به هر نقطهٔ شبکه (برای مثال، اتمهای G و A به نقطهٔ شبکهٔ A) در حقیقت ساختار کامل را تولید می‌کند. با استفاده از **بردار پایهٔ r** که در هر اتم پایه را به مبداء متصل می‌کند، مکان آن اتم درون یاخته به آسانی مشخص می‌شود. بنابراین مکان اتم واقع در F را می‌توان چنین نوشت:

$$\mathbf{r}=\frac{2}{3}\mathbf{a}+\frac{1}{3}\mathbf{b}$$

می‌گوییم که این اتم در مکان ($\frac{2}{3}$ و $\frac{1}{3}$) قرار دارد. بنابراین انتخاب پایه برای بلور گرافیت دو بعدی را می‌توان به گونهٔ اختصاری

$$C(0,0) \quad , \quad C(\frac{2}{3},\frac{1}{3})$$

نوشت که نوع شیمیایی اتم (در این مورد، کربن) با بیان علامت شیمیایی آن مشخص می‌شود. اینکه برای شناسایی کامل ساختار گرافیت دو بعدی به یک پایهٔ دو اتمی نیاز است، نشانهٔ آنست که هر یاختهٔ یکّهٔ بسیط فقط دو اتم را در بردارد. در یک بلور سه بعدی، بردارپایهٔ یک اتم را می‌توان همواره به صورت زیر نوشت

$$\mathbf{r}=x\mathbf{a}+y\mathbf{b}+z\mathbf{c}$$

و بنابراین می‌گوییم، این اتم در $(x\,,\,y\,,\,z)$ واقع است.

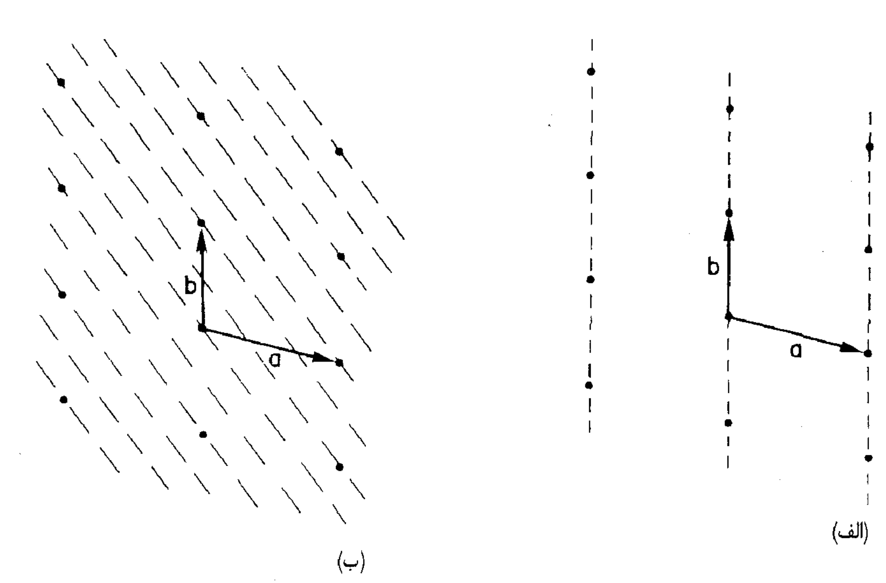
با در نظر گرفتن تقارن پایه و همچنین تقارن شبکه، هر بلور را می‌توان در یکی از **۳۲ گروه تقارنی نقطه‌ای** (که گاهی ۳۲ ردهٔ بلوری خوانده می‌شوند) و در یکی از ۲۳۰ **گروه تقارنی فضایی** ممکن طبقه بندی کرد.

در این کتاب به دانش مربوط به این دسته بندیها نیازی نیست و به خوانندگانی که نیاز به فهم این مطالب دارند توصیه می‌شود به کتابهای درسی متداول بلور شناسی رجوع کنند.

۱-۲-۳ صفحات و جهت‌های بلوری

درون یک شبکهٔ بلوری، می‌توان مجموعه‌هایی از صفحات موازی هم فاصله شناسایی کرد. دو نمونه از مجموعه‌های **صفحات شبکه** برای یک شبکهٔ دو بعدی در شکل ۱-۵ نمایش داده شده است. چگالی نقاط شبکه، روی هر صفحه‌ای از یک مجموعه، یکسان است و هر مجموعه از صفحات، تمامی نقاط شبکه را روی خود جای می‌دهند. صفحات شامل نقاط شبکه در فیزیک پراش امواج توسط بلور نقش مهمی ایفاء می‌کنند، و بنابراین داشتن روشی برای شناسایی مجموعه‌های گوناگون این صفحات ضروری است. **شاخص‌های میلر** برای این منظور به کار می‌روند. این شاخص‌ها از محل‌های تلاقی نزدیکترین صفحه به مبداء (ولی نه صفحه‌ای که از مبداء می‌گذرد) با محورهای بلوری به دست می‌آیند. به این ترتیب، در شکل ۱-۵ (ب) نزدیکترین صفحه به مبداء محورها را در $\frac{a}{۳}$ و $\frac{b}{۲}$ قطع می‌کند، و بنابراین، این مجموعه از صفحات با شاخص‌های میلر (۳۲) مشخص می‌شوند؛ توجه کنید که ***وارون*** محل تلاقی‌ها شاخص‌های میلر را تعیین می‌کنند؛ در نتیجه یک شاخص بزرگ نشانگر یک محل تلاقی کوچک است. شکل ۱-۵ (الف) مورد خاصی را نشان می‌دهد که در آن محل تلاقی در بینهایت است، در نتیجه شاخص میلر متناظر با آن صفر است؛ به این ترتیب صفحات (۱۰) با محور y موازی‌اند.

برای مجموعه‌ای از صفحات شبکه در شبکهٔ سه بعدی، نزدیکترین صفحه به مبداء دارای محلهای تلاقی a/h، b/k ، c/l است و این مجموعه از صفحات با شاخص‌های میلر (hkl) نشان داده می‌شوند. برخی از نمونه‌های سه بعدی در شکل ۱-۶ نمایش داده شده‌اند. صفحات (۱۰۰) با هر دو محور y و z و در نتیجه با صفحه yz موازی‌اند. محلهای تلاقی منفی با علامت منها واقع بر بالای شاخص مربوطه نشان داده می‌شوند؛ مانند $(\bar{1}\bar{1}1)$ و $(2\bar{1}0)$. ولی مجموعهٔ صفحات $(\bar{h}\ \bar{k}\ \bar{l})$ با مجموعهٔ صفحات (hkl) یکسان‌اند. توجه داشته باشید که اگر a، b و c یک یاختهٔ یکهٔ بسیط را تعریف کنند، شاخص‌های میلر یک مقسوم علیه مشترک ندارند، برای فهم اینکه چرا این طور است، مجموعه‌ای از صفحات با شاخص‌های میلر (۶۴) در شکل ۱-۵ (ب) را در نظر بگیرید؛ چنین مجموعه‌ای با صفحات (۳۲) موازی است، ولی فاصلهٔ بین صفحه‌ای آنها نصف فاصلهٔ بین صفحات (۳۲) است. بنابراین صفحات (۶۴) به طور یک در میان دارای نقاط شبکه‌اند.



شکل ۱-۵: الف مجموعهٔ صفحات (۱۰) در یک شبکه دو بعدی (ب) مجموعه صفحات (۳۲) در یک شبکه دو بعدی.

(100) (110) (111)

(201) $(2\bar{1}0)$ $(1\bar{1}1)$

شکل ۱-۶: برخی از صفحات بلوری در یک یاختهٔ یکّه، همراه با شاخص‌های میلر آنها.

در بلورهای با تقارن زیاد ممکن است برخی از مجموعه‌های صفحات به وسیلهٔ تقارن به هم مربوط شوند و به این ترتیب از دیدگاه اتمی معادل یکدیگر باشند. در بلورهای با تقارن مکعبی، که در آنها اضلاع یاختهٔ یکّه **a**، **b** و **c** از نظر بزرگی مساوی و دو به دو برهم عمودند، سه مجموعه از صفحات (۱۰۰)، (۰۱۰) و (۰۰۱) به وسیلهٔ تقارن به هم مربوطه می‌شوند؛ می‌گوییم که این صفحات متعلق به ریخت {۱۰۰} هستند. آکولاد به معنای *تمامی صفحاتی است که از نظر تقارنی با صفحهٔ مورد نظر معادل‌اند.*

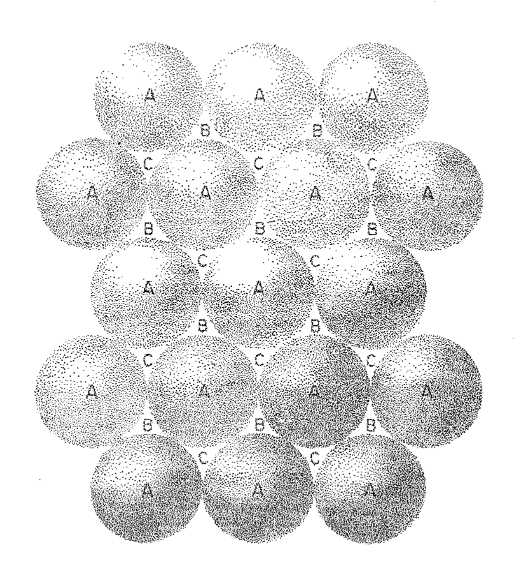
اغلب ضروری است که جهت یک بردار **r** را در بلور مشخص کنیم. بردار را همواره می‌توان به صورت $\mathbf{r}=u\mathbf{a}+v\mathbf{b}+w\mathbf{c}$ نوشت و در نتیجه این جهت را می‌توان با استفاده از علامت کروشه به صورت "جهت $[uvw]$" نشان داد. اگر همان طور که معمول است این جهت متناظر با جهت بین دو نقطهٔ شبکه باشد. از معادلهٔ ۱-۲ نتیجه می‌شود که باید u، v و w اعداد صحیحی باشند. مهم است که به یاد داشته باشیم که شاخص‌های درون کروشه شاخص‌های میلر نیستند، هر چند که در مورد بلورهای مکعبی در نتیجهٔ تقارن جهت $[uvw]$ بر صفحات با شاخص‌های میلر (uvw) عمود است، (مسئله ۱-۳). بنابراین در این مورد که در بیشتر مثالهای عملی به کار برده می‌شود، جهت $[uvw]$ و صفحات (uvw) به سادگی به هم مربوط می‌شوند.

۱-۳ ساختارهای بلوری نوعی

۱-۳-۱ ساختارهای مکعبی و شش‌گوشی تنگ پکیده

ساختار بلوری که یک مادهٔ بخصوص به خود می‌گیرد به ماهیت نیروهای بین اتمهای درون آن بستگی دارد. در برخی از جامدها، به ویژه در جامدهائ گازهای بی‌اثر و در اکثر فلزات، این نیروها چنان هستند که اتمها با تقریب خوبی مانند کره‌های سختی که همدیگر را جذب می‌کنند عمل می‌کنند. در چنین مواردی برای داشتن انرژی کمینه، لازم است که این کره‌ها تا حدامکان تنگ پکیده شوند. این اصل در دو بعد منجر به ساختار لایه‌ای تنگ پکیده می‌شود که در شکل ۱-۷ نشان داده شده است؛ این، بلوری دو بعدی است که در آن مراکز کره‌ها روی یک شبکه سه گوش مانند شکل ۱-۴ (د) قرار گیرند. اگر یک لایهٔ تنگ پکیدهٔ دوم طوری روی لایهٔ اول قرار گیرد که مرکز کره‌های این لایه بالای فرورفتگیهای لایهٔ اول قرار گیرند، می‌توان تنگ پکیدگی را به سه بعد گسترش داد. برای مثال فرض کنید که لایهٔ دوم مکانهای B در شکل ۱-۷ را اشغال کند. به این ترتیب هر کره در لایهٔ دوم با سه کره در لایهٔ اول در تماس است. و پکیدن تا حدامکان تنگاتنگ خواهد بود. وارسی شکل ۱-۷ نشان می‌دهد که یک چنین پکیدن را می‌توان به راههای گوناگون ادامه داد؛ زیرا لایهٔ سوم می‌تواند یکی از مکانهای C یا A را اشغال کند؛ دو مجموعه از مکانها در فرورفتگیهای لایهٔ دوم قرار دارند.

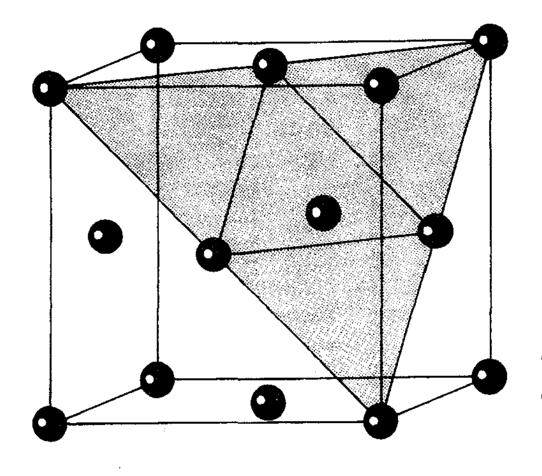
یک دنبالهٔ روی هم قرار گرفتن بسیار متداول به صورت .....$ABCABC$ است که ساختار



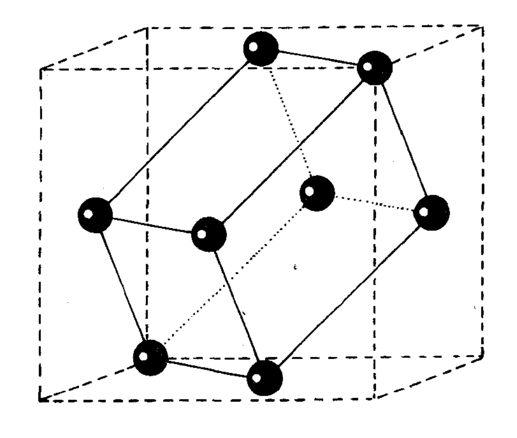
شکل ۱-۷: یک لایهٔ تنگ پکیده از کره‌هایی که مکانهای A را اشغال می‌کنند. لایه‌های مجاور می‌توانند مکانهای B یا C را اشغال کنند.

معروف به **تنگ پکیدهٔ مکعبی** (ccp) یا مکعبی مرکز سطحی (fcc) را پدید می‌آورد. یاختهٔ یکّهٔ مکعبی این ساختار در شکل ۱-۸ نشان داده شده است؛ اتمها در گوشه‌ها و در مرکز هر وجه یاخته قرار دارند. برای آنکه رابطهٔ بین این ساختار و شکل ۱-۷ روشن شود، لایهٔ تنگ پکیده‌ای از اتمها در شکل ۱-۸ سایه زده شده است؛ این یک صفحهٔ (۱۱۱) است که بر قطر مکعب عمود است. با استفاده از تقارن نتیجه می‌شود که تمامی صفحات ریخت {۱۱۱} صفحات تنگ پکیده‌اند. محیط اطراف همهٔ اتمها در ساختار fcc یکسان است به گونه‌ای که شبکهٔ بلوری، متناظر با ساختار اتمی است. یاختهٔ یکّهٔ **بسیط** لوزی رخ این شبکه در شکل ۱-۸ (ب) نشان داده شده است. ولی گزینش یاختهٔ قراردادی نابسیط به صورت یاخته یکّهٔ مکعبی شکل ۱-۸ (الف) است، زیرا این یاخته تقارن مکعبی کامل را آشکارتر نشان می‌دهد. یاختهٔ قراردادی حجمی چهار برابر حجم یاختهٔ بسیط دارد و به این ترتیب چهار نقطهٔ شبکه را در بر دارد. شگفت آور نیست که شبکهٔ ساختار fcc، در دسته‌بندی براوه با نام شبکهٔ fcc مشخص می‌شود. مثال‌هایی از عنصرهایی که با ساختار fcc متبلور می‌شوند عبارتند از آلومینیوم، کلسیم، نیکل، مس، نقره، طلا، سرب، نئون، آرگون، کریپتون و گزنون.

در ساختار fcc، محیط اطراف یک اتم را می‌توان به بهترین وجه با مشاهدهٔ **چند وجهی هم‌آرایی اتمی** مجسم کرد. این چند وجهی از صفحات عمود منصف خطوطی که یک اتم را به همسایه‌هایش وصل می‌کند تشکیل می‌شود. تصور کنید که با استفاده از کره‌هایی از جنس



(الف) یاخته یکهٔ مکعبی نابسیط قراردادی که یک صفحهٔ تنگ پکیده (۱۱۱) را نشان می‌دهد.



(ب) یاختهٔ یکّهٔ لوزی رخ بسیط

شکل ۱-۸: ساختار تنگ پکیدهٔ مکعبی (ccp) یا مکعبی مرکز سطحی (fcc)

پلاستی سین مدلی برای این ساختار ساخته باشید و سپس آن را بفشارید، بعد از آن اگر کره‌ها، را از هم جدا کنید، می‌بینید که کره‌ها به شکل چند وجهی‌های هم‌آرایی تغییر شکل یافته‌اند*.

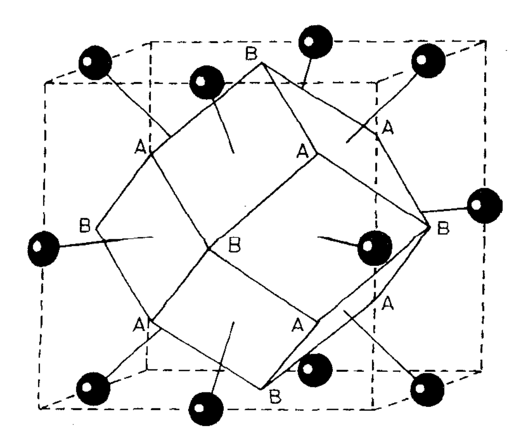
به این ترتیب چند وجهی هم‌آرایی نمایشگر "**کرهٔ تأثیر**" یک اتم است. چند وجهی هم‌آرایی ساختار fcc همراه با مکانهای نزدیکترین اتمهای همسایه در شکل ۱-۹ نشان داده شده است. شکل ۱-۹ یک یاختهٔ یکهٔ مکعبی را نشان می‌دهد که مبداء آن در مقایسه با مبداء شکل ۱-۸، به اندازهٔ نصف یک یال مکعب و در راستای محور مکعب، در جهت [۱۰۰] ، انتقال یافته

* این روش در واقع برای بررسی ساختارهای بی‌نظم (مایع) توسط برنال به کار رفته است.

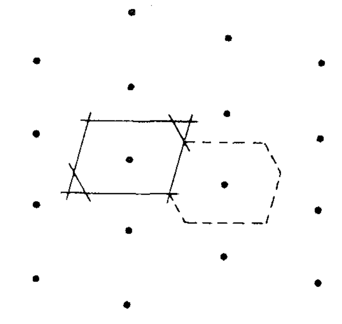
است. این چند وجهی موسوم به دوازده وجهی لوزی رخ است و ۱۲ وجه دارد که متناظر با تماس ۱۲ نزدیکترین همسایه است. بنابراین گفته می‌شود که هر اتم دارای **عدد هم‌آرایی** ۱۲ است. تقارنهای مشخصهٔ ساختار مکعبی (و خود مکعب) را می‌توان روی این چند وجهی شناسایی کرد این دوازده وجهی لوزی رخ دارای چهار محور تقارنی سه تایه است که از زوج گوشه‌های مقابل هم A می‌گذرند (جهت‌های [۱۰۰]). دوران $^\circ$۱۲۰ حول هر یک از این محورها دوازده وجهی را در وضعیت یکسانی قرار می‌دهد. سه محور چهار تایه از زوجهای مقابل هم B می‌گذرند (جهت‌های [۱۰۰]) و شش محور دو تایه از مراکز وجوه متقابل می‌گذرند (جهت‌های [۱۱۰]).

چند وجهی‌های هم‌آرایی ساختار fcc همه با یک سمت گیری به نحوی روی هم انباشته می‌شوند که تمامی فضا را پر می‌کنند. در نتیجه این چند وجهی انتخاب دیگری برای یاختهٔ یکّهٔ بسیط بلور است. این نوع یاختهٔ یکّه به یاد بود کسانی که نخست آن را برای یک مسئلهٔ مکانیک کوانتومی به کار بردند، به **یاختهٔ ویگنر- زایتس** موسوم است. یاختهٔ ویگنر- زاتیس برای یک شبکهٔ عمومی به صورت کوچکترین چند وجهی تعریف می‌شود که بین صفحات عمود منصف بردارهای و اصل یک نقطهٔ شبکه با دیگر نقاط شبکه محصور می‌شود. شکل ۱-۱۰ روش ساختن یاختهٔ ویگنر- زایتس برای یک شبکه دو بعدی را نمایش می‌دهد، از این تعریف نتیجه می‌شود که فضای درون یاختهٔ ویگنر- زایتس مکان هندسی نقاطی است که فاصلهٔ آنها تا یک نقطهٔ شبکهٔ معلوم کمتر از فاصله تا هر نقطهٔ شبکه دیگر است. فقط برای مورد خاصی که هر اتم، نمایشگر یک نقطهٔ شبکه است، یاخته ویگنر- زایتس چند وجهی هم‌آرایی اتمی نیز هست.

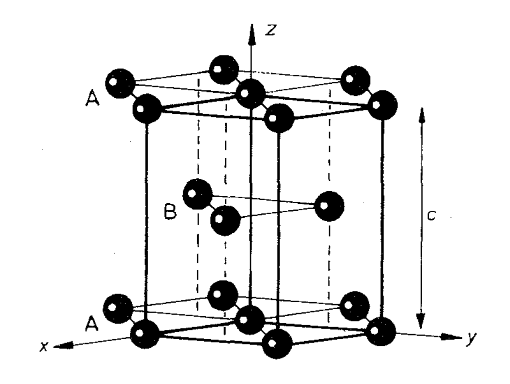
یک ترتیب متداول دیگر روی هم قرار گرفتن لایه‌های تنگ پکیده در شکل ۱-۷ $ABABAB$.... است؛ این ترتیب، **ساختار تنگ پکیدهٔ شش ضلعی شش گوش** (hcp) که در شکل ۱-۱۱ (الف) نشان داده شده است را پدید می‌آورد. در این ساختار، محیط اطراف تمام



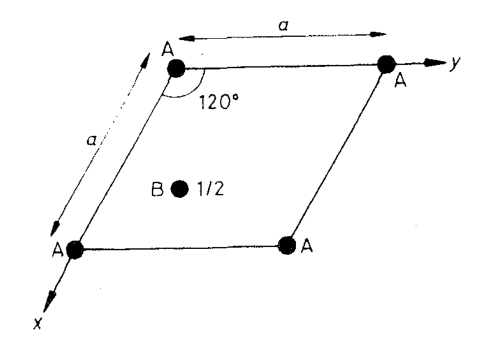
شکل ۱-۹: چند وجهی هم‌آرایی ساختار ccp: دوازده وجهی لوزی رخ. مبدأ محورهای بلورشناسی انتقال یافته است. به طوری که یک اتم در مرکز یاختهٔ یکّه قرار می‌گیرد. پیوندهای این اتم با نزدیکترین همسایگانش نشان داده شده‌اند.



شکل ۱-۱۰ : یاخته ویگنر-زایتس (خط چین) یک شبکهٔ دو بعدی، از ترسیم صفحات منصف (خط پر) خطوط واصل بین یک نقطهٔ شبکه و همسایگانش به دست می‌آید.



(الف) ساختار شش گوشی تنگ پکیده با یاختهٔ یکّهٔ بسیط که با خط پهن‌تر نشان داده شده است



(ب) نمای تخت یاختهٔ یکّهٔ بسیط ساختار شش گوشی تنگ پکیدهٔ *(hcp)*. مقدار $\frac{۱}{۲}$ نمایشگر ارتفاع اتم در راستای محور z برحسب فاصلهٔ شبکه c است. پایه، دو اتم در (۰ ۰ ۰) و ($\frac{۲}{۳}\frac{۱}{۳}\frac{۱}{۲}$) دارد.

شکل ۱-۱۱

اتمهای صفحهٔ A - مانند هم است و لذا این نقاط را می‌توان به منزلهٔ نقاط شبکه اختیار کرد. محیط اطراف اتمهای صفحهٔ B - با محیط اطراف اتمهای صفحهٔ A - متفاوت است، در نتیجه اتمهای صفحهٔ B بر نقاط شبکه قرار نمی‌گیرند. شبکه حاصل با نام شبکهٔ شش گوش در دسته‌بندی براوه مشخص می‌شود. گزینش قراردادی محورهای بلورشناسی برای این شبکه در شکل ۱-۱۱ (الف) نشان داده شده است و یاختهٔ یکّهٔ بسیط حاصل با خطوط پهن‌تر نشان داده می‌شوند. شکل ۱-۱۱ (ب) روش دو بعدی آسانتری برای ترسیم این یاختهٔ یکّهٔ بسیط است. این شکل نمای تختی را، از دید ناظر واقع بر راستای محور z نشان می‌دهد؛ مختصهٔ z اتم درون این یاخته به صورت کسری از یال c ی یاختهٔ یکّه، نشان داده شده است. این یاختهٔ یکّه، پایه‌ای با یک اتم A در (۰ ، ۰ ، ۰) و یک اتم B در $(\frac{۲}{۳}\,\frac{۱}{۳}\,\frac{۱}{۲})$ را در برمی‌گیرد. در ساختار hcp، صفحات تنگ پکیدهٔ A صفحات (۰۰۱) هستند، در این ساختار صفحات B ، در وسط فاصلهٔ بین صفحات A قرار می‌گیرند.

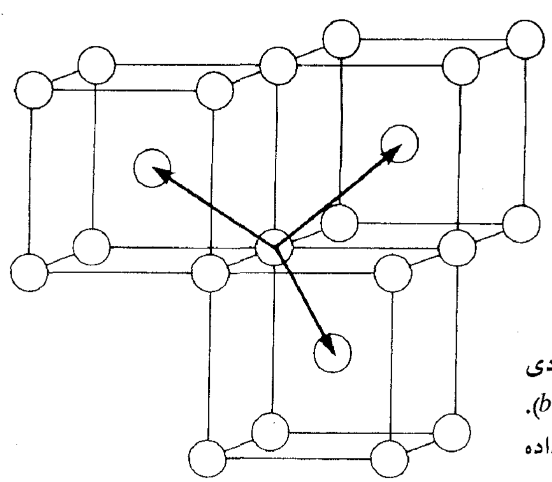
چون محیط اطراف اتمهای A و B متفاوتند، چند وجهی‌های هم آرایی آنها هم شکل هستند، ولی از نظر سمتگیری متفاوتند. از آنجا که در هر یاختهٔ یکّهٔ بسیط دو اتم وجود دارد، حجم یاختهٔ یکّهٔ ویگنر- زایتس مربوط به شبکهٔ hcp دو برابر حجم هر چند وجهی هم آرایی است و با آن رابطهٔ ساده‌ای ندارد.

با استفاده از هندسهٔ مقدماتی می‌توان نسبت c/a ثابتهای شبکه را برای تنگ پکیدگی شش گوشی "ایده‌آل" از کره‌های سخت برابر ۱/۶۳۳ = $(\frac{۸}{۳})^{\frac{۱}{۲}}$ به دست آورد، (مسئله ۱-۱) این مقدار ایده‌آل البته، ناشی از اعمال تقارن شش گوشی شبکه نیست. چون اتمها در واقع کره‌های سخت نیستند، لذا، نسبت محوری یاختهٔ یکّه، $\frac{c}{a}$ ، با مقدار ایده‌آل اندکی تفاوت دارد. نمونه‌هایی از عناصری که با ساختار hcp متبلور می‌شوند همراه با مقادیر $\frac{c}{a}$ مربوط به آنها در پرانتز عبارتند از : منیزیوم (۱/۶۲۳)، تیتانیوم (۱/۵۸۶)، روی (۱/۸۶۱)، کادمیوم (۱/۸۸۶)، کبالت (۱/۶۲۲) و هلیوم (۱/۶۳۳).

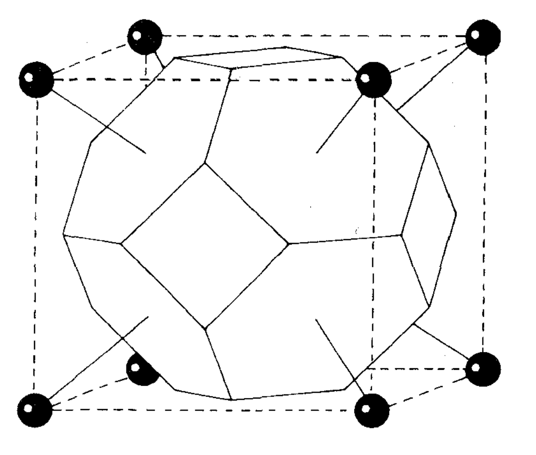
گهگاهی، ترتیب‌های پیچیده‌تر روی هم قرار گرفتن لایه‌های تنگ پکیده، چون ABACABAC......، به خصوص در خاکیهای کمیاب، یافت می‌شوند. این حالت‌های نامتعارف در این کتاب مورد بحث قرار نمی‌گیرند.

۱-۳-۲ ساختار مکعبی مرکز حجمی

یک ساختار مکعبی که فقط اندکی کمتر از fcc تنگ پکیده باشد ساختار مکعبی مرکز حجمی (bcc) است، که سه یاختهٔ یکّهٔ مکعبی آن در شکل ۱-۱۲ (الف) نشان داده شده‌اند. محیط اطراف تمام اتمها در این ساختار یکسان است و در نتیجه شبکه و ساختار یکسانند. یاختهٔ یکّهٔ مکعبی نابسیط برای این شبکه انتخابی قراردادی است و دو نقطهٔ شبکه را در بردارد؛ بردارهای یاختهٔ



(الف) سه یاختهٔ یکّهٔ مکعبی قراردادی ساختار مکعبی مرکز حجمی(bcc). بردارهای شبکهٔ یاختهٔ بسیط نشان داده شده‌اند.



(ب) چند وجهی هم‌آرایی ساختار bcc. رخهای شش گوش نمایشگر تماس با هشت نزدیکترین همسایه است؛ رخهای مربعی تماس با شش نزدیکترین همسایه‌های بعدی را نشان می‌دهند.

شکل ۱-۱۲

بسیط در شکل ۱-۱۲ (الف) نشان داده شده‌اند. هشت رخ **شش‌گوش** چند وجهی هم‌آرایی که در شکل ۱-۱۲ (ب) نمایش داده شده‌اند، تماس یک اتم با هشت نزدیکترین همسایگانش را نشان می‌دهند؛ بنابراین عدد هم آرایی ساختار bcc برابر ۸ است. این عدد از عدد هم‌آرایی ساختارهای fcc و hcp (یعنی ۱۲) کوچکتر است، ولی وجود شش رخ **مربعی** در چند وجهی هم‌آرایی نشانگر آن است که یک اتم در بلور bcc دارای شش نزدیکترین همسایهٔ بعدی است که از نخستین نزدیکترین همسایگان چندان دورتر نیستند. عنصرهای فلزی لیتیوم، سدیم، پتاسیم،

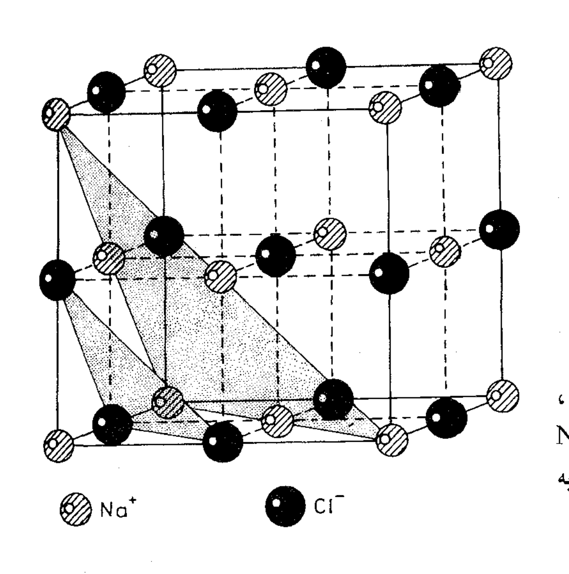
کروم، باریوم و تنگستن با ساختار bcc متبلور می‌شوند.

۱-۳-۳ ساختارهای جامدهای یونی

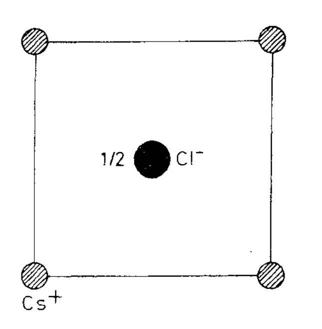
اکنون نمونه‌هایی از ساده‌ترین بلورهایی راکه اتمهایی بیش از یک نوع در بردارند و به جامدهای یونی موسوم‌اند بررسی می‌کنیم. چون یونهای با بارهای مخالف، با کره‌های سخت‌جذب کنندهٔ یکدیگر تقریب زده می‌شوند، ساختار بلوری متشکل از آنها نیز اغلب به وسیلهٔ ملاحظات تنگ پکیدن مورد مطالعه قرار می‌گیرند. عموماً الکترونهای آنیون با بار منفی در مقایسه با الکترونهای کاتیون با بار مثبت به طور سست‌تری مقید هستند و بنابراین معمولاً اندازهٔ آنیون‌ها بزرگتر است. در بلورهایی که شامل تعداد یکسان از یونهای مثبت و منفی هستند، مانند کلرید سدیم $NaCl$، ساختار بلوری احتمالاً توسط تعداد آنیونها که بزرگترند و به طور محکم دورکاتیون پکیده‌اند تعیین می‌شود. در $NaCl$ این تعداد فقط شش تا است و این منجر به ساختاری چون تختهٔ شطرنجی سه بعدی می‌شود که در شکل ۱-۱۳ نشان داده شده است. محیط اطراف تمامی یونهای Na^+ در درون بلور یکسان است، به طوری که این یونها را می‌توان برای نمایش شبکه بلور که مثالی از یک شبکهٔ براوه است، اختیار کرد. یونهای Cl^- نیز روی یک شبکهٔ fcc قرار دارند که به اندازهٔ نصف یک یاختهٔ یکّه در جهت [۱۰۰] جابه جا شده است.

در شکل ۱-۱۳ نیز مشاهده می‌شود که صفحات {۱۱۱} در شبکه $\overset{+}{\text{Na}}$ شامل تمامی یونهای Na اند و شامل هیچ یونی از Cl^- نیستند. یونهای Cl^- روی صفحات موازی با و در وسط صفحات (۱۱۱) قرار می‌گیرند؛ این حقیقت نقش مهمی در شناسایی ساختار $NaCl$ داشت که نخستین ساختاری بود که توسط پراش پرتو X تعیین شد (بخش ۱-۴ را ببینید). هنگامی که این ساختار برای نخستین بار کشف شد، مشاهدهٔ اینکه در این ساختار هیچ مولکولی قابل شناسایی نبود برای برخی از شیمی دانها بسیار تکان دهنده بود. اکنون می‌دانیم که غیاب یک مولکول قابل شناسایی در بلورهای معدنی امری عادی است و با این مفهوم که بلور به منزلهٔ یک تک مولکول بسیار بزرگ است، عادت کرده‌ایم.

ساختار کلرید سزیوم، $CsCl$، شکل ۱-۱۴، نوع دیگری از ساختار جامد یونی است که تعداد مساوی آنیون و کاتیون دارد؛ یاختهٔ یکّه مکعبی یونهای Cs^+ را در گوشه‌ها و یک یون Cl^- در مرکزش دارد. در این ساختار هر یون دارای هم‌آرایی ۸ است، در نتیجه هنگامی که قرار باشد ۸ آنیون به طور محکم اطراف هر کاتیون پکیده شوند احتمال دارد که این ساختار درست شود. در این ساختار محیط اطراف تمام کاتیونها (یا همینطور محیط اطراف تمام آنیونها) یکسان است، در نتیجه مکانهای آنها یک شبکهٔ بلوری را می‌سازند. در این حالت یاختهٔ مکعبی قراردادی بسیط است و به منزلهٔ مکعبی ساده در دسته‌بندی براوه مشخص می‌شود.



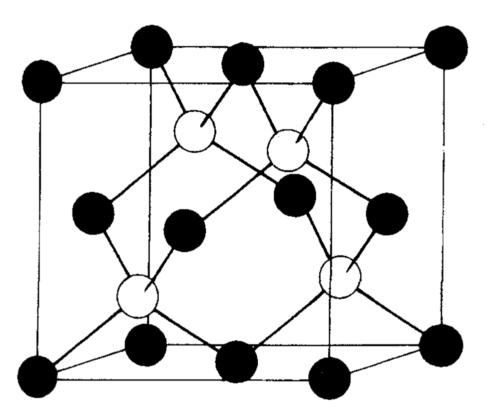
شکل ۱-۱۳ : یاخته یکّهٔ ساختار *NaCl*، با صفحات یک در میان از یونهای Na^+ و Cl^- عمود بر جهت [۱۱۱] که با سایه نشان داده شده‌اند.



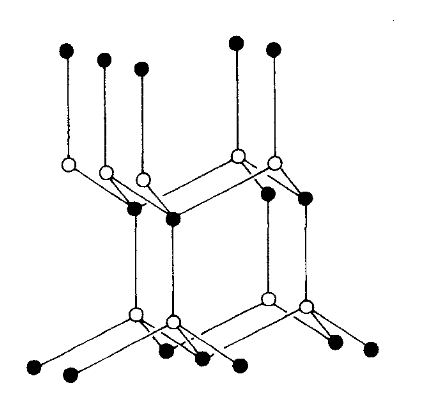
شکل ۱-۱۴ : نمای تخت یاختهٔ یکّهٔ مکعبی بسیط. پایه عبارت است از Cs^+ در ۰۰۰ و یون Cl^- در $\frac{۱}{۲}\frac{۱}{۲}\frac{۱}{۲}$.

۱-۳-۴ ساختارهای الماسی و سولفورروی

یک ساختار بسیار مهم در فیزیک حالت جامد با اتمهای کربن در الماس درست می‌شود. در این ساختار مانند شکل ۱-۱۵ هر اتم کربن به چهار نزدیکترین همسایه، که در گوشه‌های یک چهار وجهی منظم قرار دارند، به طورکووالان مقید است. شکل ۱-۱۵ نشان می‌دهد که فقط قرار نیمی از این اتمها دارای محیط اطراف یکسانند و این اتمها روی یک شبکهٔ براوهٔ ای را *fcc* می‌گیرند. اتمهای دیگر شبکهٔ جابه *fcc* تشکیل می‌دهند که به اندازهٔ یک چهارم یک یاختهٔ یکه در جهت [۱۱۱] جا شده است. این دو نوع اتم، فقط در سمتگیری پیوندها با نزدیکترین همسایگان تفاوت دارند. عدد هم‌آرائی کوچک (۴) ساختار الماسی نشانگر آن است که این ساختار با ساختار تنگ پکیده اختلاف فاحشی دارد و ماهیت نیروهای بین اتمی در آن، در مقایسه با اکثر جامدهای فلزی، یونی و "گاز بی‌اثر" بسیار متفاوت است. دو عنصر دیگر از گروه چهارم جدول



(الف) یاختهٔ یکّهٔ مکعبی قراردادی ساختار الماسی و سولفید روی. در الماس هر دو نوع جایگاه اتمی توسط اتمهای کربن اشغال می‌شوند. در سولفید روی یک نوع جایگاه توسط اتمهای روی و نوع دیگر توسط اتمهای گوگرد اشغال می‌شوند.



(ب) ترتیب چهار وجهی پیوندهای کووالانی در ساختارهای الماسی و سولفید روی، جهت قائم [۱۱۱] است.

شکل ۱-۱۵

دوره‌ای، عناصر نیمرسانای سیلیسیوم و ژرمانیوم، با ساختار الماسی متبلور می‌شوند و این موضوع اهمیت این ساختار را در فیزیک حالت جامد بیان می‌کند.

ترکیبات نیمرسانای گروه ۳ - گروه ۵ (فصل ۵ را ببینید)، مانند ارسنیدگالیوم، GaAs ، و آنتیمونیداینديوم، InSb با ساختار سولفید روی، ZnS ، متبلور می‌شوند. تنها تفاوت این ساختار با ساختار الماس در آن است که در آن به جای یک نوع از اتمهای کربن، اتم روی و به جای نوع دیگر اتم گوگرد می‌نشینند.

۱-۴ بلورشناسی پرتو X

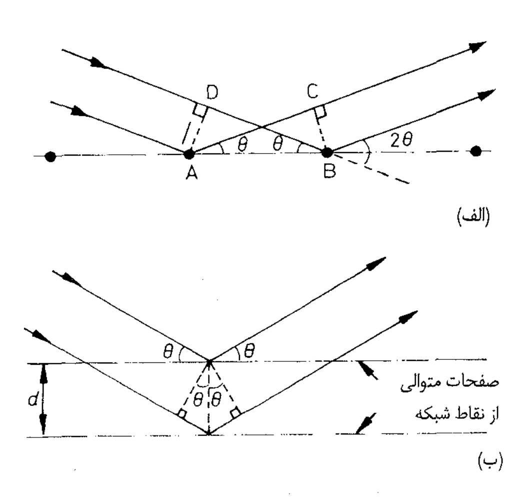
۱-۴-۱ قانون براگ

طول موج پرتوهای X نوعاً از مرتبه 1Å است که با فاصله‌های بین اتمی در جامدها قابل

مقایسه است. این به آن معنا است که یک بلور به منزلهٔ یک توری پراش سه بعدی برای پرتوهای Xرفتار می‌کند. در یک آزمایش پراش اپتیکی می‌توان با استفاده از فاصلهٔ بین بیشینه‌های پراش، فاصلهٔ بین خطوط توری و با اندازه‌گیری شدتهای نسبی مرتبه‌های مختلف، اطلاعاتی در مورد ساختار خطوط توری به دست آورد. در روشی دقیقاً مشابه می‌توان با اندازه‌گیری فاصلهٔ بین بیشینه‌های پراش از یک بلور، اندازهٔ یاختهٔ یکّه را تعیین کرد و با استفاده از شدتهای باریکه‌های پراشیده در مورد ترتیب اتمهای درون یاخته اطلاعاتی به دست آورد.

در فصل ۱۱، قوانین عمومی پراش که توسط فون لاوه[۱] فرمولبندی گردید مطالعه خواهند شد. در حال حاضر، فرمولبندی ساده‌تر و فیزیکی تری که توسط براگ کشف شد و توسط وی در محاسبات اولیهٔ تعیین ساختار بلور به کار رفت، کفایت می‌کند. براگ شرط تداخل سازندهٔ پرتوهای X پراکنده شده از مجموعه‌ای از صفحات شبکه‌ای موازی را به دست آورد.

همانطور که در شکل ۱-۱۶ (الف) نشان داده شده است، پرتوهای Xفرودی بر یکی از صفحات این مجموعه را تحت زاویهٔ خراشان θ در نظر می‌گیریم. این شکل نشان می‌دهد که اگر فاصله‌های AC , DB برابر باشند، امواج پراکنده شده از دو نقطهٔ شبکه‌ای متوالی Aو Bدر این



شکل ۱-۱۶ : اثبات قانون براگ (الف) پراکندگی پرتوهای Xاز دو نقطه شبکه‌ای متوالی Aو Bدر صفحه به شرطی همفاز خواهد بود که $AC=DB$ و در نتیجه باریکهٔ پراکنده شده همان زاویهٔ θ را با این صفحه بسازد که باریکهٔ فرودی با آن می‌سازد. (ب) پراکندگی پرتوهای Xاز صفحات متوالی به شرطی همفاز است که اختلاف راه $2dSin\theta$ مضرب درستی از طول موجها، $n\lambda$، باشد.

۱-*Von Laue*

صفحه، تداخل سازنده خواهند کرد. این وضعیت در صورتی پیش می‌آید که موج پراکنده شده همان زاویهٔ θ را با این صفحه داشته باشد که موج فرودی دارد؛ در نتیجه گوئی که موج پراشیده‌از این صفحه باز تابیده است. استفاده از زاویهٔ خراشان θ، به جای زاویهٔ فرودی، در بلورشناسی پرتو X، قراردادی است؛ شرط بازتاب اشاره بر آن دارد که باریکهٔ پرتو X به اندازهٔ زاویهٔ ۲θ منحرف شده است. توجه کنید که پراکندگی وابسته به نقاط شبکه‌ای را به جای پراکندگی ناشی از اتمها در نظر گرفته‌ایم، زیرا پایه اتمهای مربوط به هر نقطهٔ شبکه است که واحد تکرار شوندهٔ بلور را می‌سازد؛ نقطهٔ شبکه مانستهٔ خط روی توری پراش اپتیکی است و پایه، ساختار این خط را نمایش می‌دهد.

پراکندگی همدوس از یک تک صفحه برای حصول یک بیشینهٔ پراش کافی نیست. علاوه، بر آن لازم است که صفحات متوالی به طور همفاز پراکنده سازند. این وقتی است که اختلاف راه برای پراکندگی از دو صفحهٔ متوالی مضرب صحیحی از طول موج باشد. از شکل ۱-۱۶ (ب) می‌بینیم که به شرطی چنین است که

$$۲d\,Sin\,\theta = n\lambda \qquad (۱-۳)$$

که در آن d فاصلهٔ بین صفحات و n عدد درست است. این قانون براگ است.

باریکه‌های پراشیده از هر مجموعه صفحات شبکه (که اغلب به منزلهٔ بازتاب قلمداد می‌شود) فقط تحت زوایای خاصی، که با قانون براگ بیان می‌شود پدیدار می‌شوند. بلورشناسان پرتو X، برای مشخص کردن بازتابها، شاخص‌های میلر را به کار می‌برند. باریکهٔ مربوط به یک n بزرگتر از ۱ را می‌توان با عبارتی چون بازتاب مرتبهٔ nام از صفحات (hkl) بیان کرد. ولی این تا حدودی مایهٔ زحمت است و در عوض، چنین باریکه‌ای را به طور مختصرتر به صورت بازتاب (($nh\ nk\ nl$)) توصیف می‌کنند. بنابراین بازتاب مرتبهٔ سوم از صفحات (۱۱۱) به صورت بازتاب (۳۳۳) بیان می‌شود. این نمادگذاری با نوشتن قانون براگ به صورت زیر توجیه می‌شود.

$$۲(d/n)\,Sin\theta = \lambda$$

این باعث می‌شود که پراش مرتبهٔ nام از صفحات (hkl) به فاصلهٔ d از هم، همانند نخستین بازتاب از صفحات به فاصله d/n به نظر برسد. صفحات با این فاصلهٔ کاهش یافته دارای شاخص‌های میلر ((nh nk nk)) هستند.

برای نمایش اصول کلی تحلیل ساختار به وسیلهٔ پرتو X، به توضیح روشی خواهیم پرداخت که براگ توسط آن ساختار NaCl و KCl [1] را در همان مجموعهٔ آزمایشهایی تعیین کرد که در آنها وجود خطوط طیفی پرتوی X را نشان داده بود. روال عمومی‌تر تعیین ساختار توسط روشهای

۱- *Proc.R.Soc.A89 248 (1914)*

پراش را می‌توان در فصل ۱۱ یافت. براگ با استفاده از ترتیبی همانند یک طیف سنج معمولی شدت بازتاب آئینه‌ای از یک رخ شکافته شدهٔ یک بلور را اندازه گرفت و شش مقدار برای θ به دست آورد که به ازای آنها ستیغهای تیزی در شدت پدیدار می‌شدند. این مقادیر متناظراند با سه طول موج مشخصه (پرتوهای X مربوطه به K، L و M) در مرتبهٔ اول و دوم [$n=۱$ و $n=۲$ در معادله (۱-۳)] است. براگ با تکرار آزمایش با یک رخ بلوری دیگر توانست، با کاربرد معادلهٔ (۱-۳)، مثلاً نسبت فواصل بین صفحه‌ای (۱۰۰) و (۱۱۱) را به دست آورد؛ و با این اطلاعات تقارن مکعبی این ترتیب اتمی تأیید شد.

سپس با استفاده از اختلافهای بین نقشه‌های پراش برای $NaCl$ و KCl جزئیات این ساختار را استنتاج کرد. غیاب بازتاب (۱۱۱) در KCl در مقایسه با یک بازتاب ضعیف ولی به وضوح قابل آشکار سازی (۱۱۱) در $NaCl$ از اختلافهای عمده بود. این امر ناشی از آن است که یونهای K^+ و Cl^- هر دو دارای ساختار پوستهٔ الکترونی آرگون هستند و بنابراین پرتوهای X را تقریباً به طور یکسان پراکنده می‌کنند، در حالی که یونهای Na^+ و Cl^- دارای قدرت پراکندگی متفاوتند. بازتاب (۱۱۱) در $NaCl$ متناظر است با یک طول موج متناظر با اختلاف راه بین صفحات همسایهٔ (۱۱۱) و بنابراین متناظر است با نصف طول موج متناظر با اختلاف راه بین صفحات یک در میان یونهای Na^+ و Cl^- که ساختار بلوری شکل ۱-۱۳ را می‌سازد. بنابراین اختلاف در پراکندگی پرتوهای X به وسیلهٔ یونهای Na^+ و Cl^-، برای جلوگیری از حذف بازتاب (۱۱۱) به وسیلهٔ تداخل ویرانگر، ضروری است. براگ توانست استنتاج کند که ساختار $NaCl$ و KCl متناظر است با صفحات یک در میان یونهای مثبت و منفی عمود بر جهت [۱۱۱] و از آنجا ساختار شکل ۱-۱۳ را به دست آورد.

۱-۴-۲ ترتیب‌های تجربی برای پراش پرتو X

پس از کار پیشگام براگ، پراش پرتو X به صورت یک روش متداول در تعیین ساختار بلور گسترش یافت. در اغلب آزمایشها، با شتاب دادن الکترونها تحت اختلاف پتانسیل از مرتبهٔ $۳۰KeV$ و برخورد آنها با یک هدف فلزی پرتوهای X تولید می‌شوند؛ گسیل پرتو X مخلوطی از خطوط مشخصهٔ (K، L، M و غیره) اتمهای فلز و یک زمینهٔ پیوسته است که با طول موج به طور هموار تغییر می‌کند. با تغییر ولتاژ شتاب دهنده می‌توان مقادیر نسبی در این مخلوط را تغییر داد و پرتوهای X تقریباً تکفام یا یک طیف وسیع **سفید** به دست آورد.

اگر به چشمهٔ پرتوهای X با شدت بالاتری نیاز باشد، می‌توان از تابش شدید گسیل شده توسط ذرات باردار (معمولاً الکترونها) در یک سنیکروترون استفاده کرد. ذرات باردار، به دلیل شتاب وابسته به مدار خود به طور عمده در جهتی مماس بر مسیرشان تابش می‌کنند. شدت تابش سینکروترونی معمولاً در بالای یک مقدار کمینهٔ قطع، که به شعاع خمیدگی مسیر و انرژی

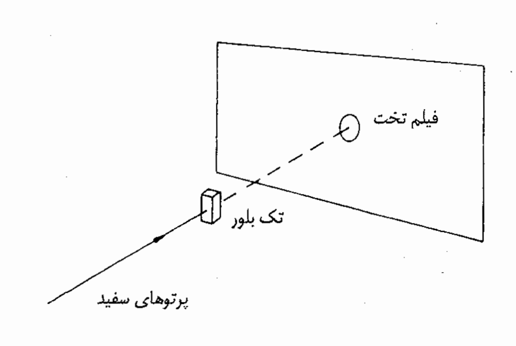
ذرات بستگی دارد، با طول موج به طور هموار تغییر می‌کند. با قرار دادن آهنرباهای خم کننده مسیر حرکت الکترونها، در بازه‌های منظم در راستای قسمتی مستقیم از سنیکروترون، می‌توان شدت تابش را در یک طول موج خاص بیشینه ساخت. این پیکربندی را یک موج ساز می‌نامند و گزینش طول موج به دلیل تداخل سازنده بین تابش گسیل شده در مجاورت آهنرباهای متوالی صورت می‌گیرد. مثالهایی از وضعیت‌هایی که در آنها تابش سنیکروترونی به کار می‌رود عبارتند از تعیین ساختار بلورهای بسیار کوچک و بلورهای متشکل از مولکولهای بیولوژیکی که یاختهٔ یکّهٔ آنها ممکن است هزاران اتم را در برداشته باشند. در مورد دوم برای تعیین عامل ساختار لازم است که شدتهای تعداد زیادی از باریکه‌های پراشیدهٔ نزدیک به هم را اندازه بگیریم.

انواع بسیاری از دوربین‌های پرتو X برای سوا کردن بازتابهای از صفحات بلورین متفاوت اختراع شده‌اند. فقط سه نوع بسیار متداول عکسهای پرتو X را توصیف خواهیم کرد که بیشتر برای ساختارهای ساده‌ای که در این کتاب مطالعه می‌شوند به کار می‌روند.

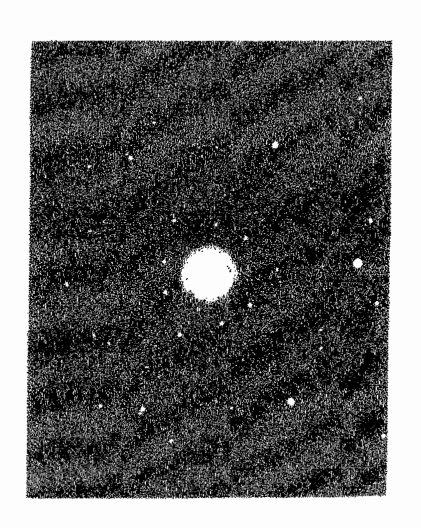
برای یک **عکس لاوه** که از نظر تاریخی اولین نوع است، مطابق شکل ۱-۷ (الف) یک باریکهٔ موازی شدهٔ پرتوهای X ″ سفید ″ (یعنی طیف پیوسته) بر یک تک بلور تابانده می‌شود. هر مجموعه از صفحات بلوری از شرط براگ، معادله (۱-۳)، برای یک طول موج پیروی می‌کند (اگر گستردگی طول موج به اندازهٔ کافی بزرگ باشد، شاید چندین طول موج برای مرتبه‌های مختلف پراش پدیدار شوند) و باریکه‌های پراشیده حاصل نقشه‌ای از لکه‌های روی فیلم عکاسی را نظیر شکل ۱-۱۷ (ب) تولید می‌کند. تقارن این نقشهٔ لکه‌ها، نشان‌دهندهٔ تقارن بلور در راستای جهت باریکهٔ فرودی است. استخراج تقارن بلور یکی از کاربردهای عمدهٔ روش لاوه است؛ روش لاوه اغلب برای تعیین سمتگیری تک بلورهایی که دارای وجوه خارجی کاملاً رشد یافته نیستند به کار می‌رود.

وقتی یک **تک** بلور در معرض یک باریکه موازی شدهٔ **تکفام**[۱] از پرتوهای X قرار می‌گیرد، عموماً هیچ پراشی رخ نمی‌دهد، زیرا هیچ مجموعه‌ای از صفحات شبکه برای پیروی از قانون براگ در زاویهٔ صحیحی قرار نگرفته است. اگر بلور حول محور ثابت عمود بر باریکهٔ پرتو X بچرخد، برای مجموعه‌هایی از صفحات که بر محور چرخش عمود نیستند، زاویهٔ خراشان θ تغییر می‌کند. احتمال دارد که مجموعه‌ای از این صفحات شرط براگ را برای یک سمتگیری بلور ارضاء کند. این مبنای **روش بلور چرخان** است؛ بلور نوعاً توسط یک فیلم عکاسی به شکل یک استوانهٔ موازی با محور چرخش احاطه می‌شود و نقشهٔ حاصل از لکه‌های پراش برای تعیین ساختار مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌گیرد.

یک روش دیگر برای حصول اطمینان از اینکه مجموعه‌هایی از صفحات بلور تحت زوایای



(الف) **ترتیب هندسی آزمایش عکس لاوه.**

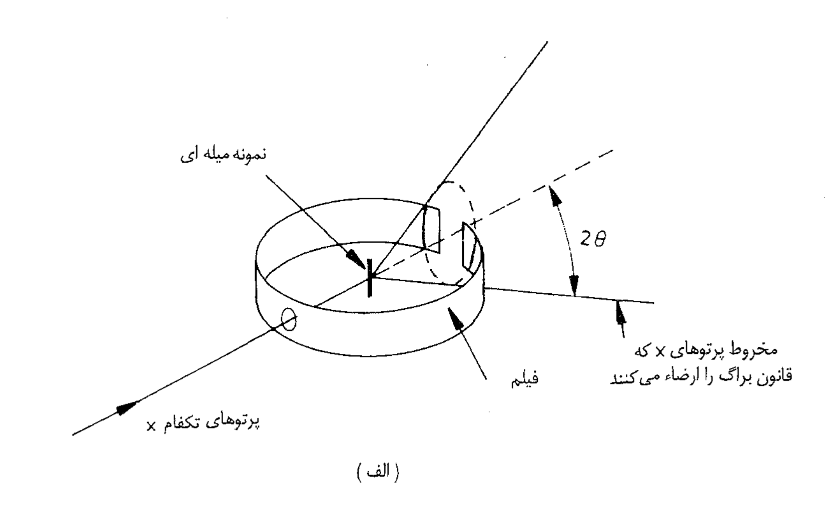


(ب) **عکس لاوه از Si با رخ (۱۱۱) عمود بر پرتوهای X. به تقارن سه تایه توجه کنید**[1]**.**

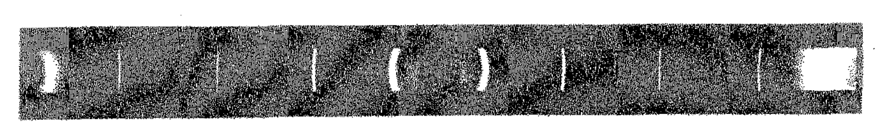
شکل ۱-۱۷

صحیح وجود دارند که، قانون براگ، برای یک باریکهٔ فرودی تکفام از پرتوهای X، ارضا شود عبارت است از کاربرد نمونه‌ای متشکل از تعداد بیشماری دانه‌های کوچک بلورین چسبیده به هم. اگر سمتگیری این دانه‌ها کره‌ای باشد، برای هر مجموعه‌ای از صفحات بلوری، برخی از دانه‌ها طوری خواهد بود که با پرتوهای X زاویهٔ براگ θ بسازند. مکان هندسی باریکه‌های بازتابیده از یک مجموعهٔ صفحات در دانه‌های مختلف به شکل مخروطی با نیم زاویهٔ 2θ است که مطابق شکل ۱-۱۸ (الف) باریکهٔ فرودی به منزلهٔ محور این مخروط است؛ محل تلاقی مخروط پرتو X با فیلم خطی بر روی عکس پدید می‌آورد. مثال نوعی از **عکس پودری** در شکل ۱-۱۸ (ب)

۱- این تصویر با اجازه از کتاب زیر اتخاذ شده است:
Elements of x - ray Crystallography by Leonid V.Azarof © . 1968 McGraw-Hill Book Company Inc.



(الف)



(ب)

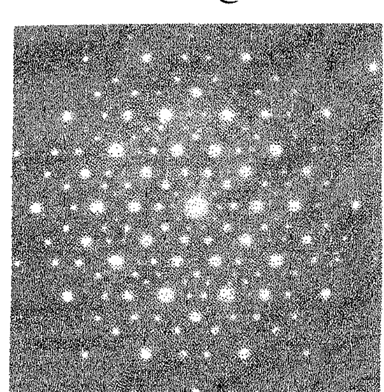
شکل ۱-۱۸ : (الف) ترتیب هندسی آزمایش برای یک عکس پودری. (ب) عکس پودری مولیبدن که با تابش $CoK\alpha$ گرفته شده است. پرتوهای X از طریق سوراخی در مرکز فیلم وارد دوربین می‌شوند و بین انتهاهای فیلم دوربین را ترک می‌کنند. توجه داشته باشید که دوتایی پرتو X، $K\alpha_1 - K\alpha_2$ (طول موجهای $1/789\,\text{Å}$ و $1/793\,\text{Å}$) برای تابش پراکندگی برگشتی در نزدیکی سوراخ ورودی از هم جدا می‌شود. (با سپاس از اچ-لیپسون)

نشان داده شده است؛ هر خط نمایشگر پراش از مجموعهٔ متفاوتی از صفحات شبکه است. ساختاربلوری با استفاده از مقادیر θ ی اندازه‌گیری شده و شدت‌های نسبی بازتابها تعیین می‌شود. کاربرد دیگر روش پودری از توان جداکنندگی بسیار بالایی حاصل می‌شود که می‌توان برای تابشی که تقریباً به سوی عقب پراکنده می‌شود به دست آورد؛ تفکیک دو تایی $\text{CoK}\alpha$ در شکل ۱-۱۸ (ب) گواهی است بر این موضوع. معادلهٔ (۱-۳) نشانگر آن است که وقتی θ به 90° نزدیک می‌شود، نسبت به مقدار دقیق d بسیار حساس می‌شود. در نتیجه ابعاد بسیار دقیق یاختهٔ یکّه را می‌توان با استفاده از تابش پراکندهٔ تقریباً برگشتی به دست آورد و این کار روش ارزشمندی را برای اندازه‌گیری انبساط گرمایی فراهم می‌سازد.

* ۱-۵ شبه بلورها

برای بلورشناس علاقمند به ساختارهای منظمی که قبلاً در این فصل توصیف شدند عکس لاوهٔ پرتو X در شکل ۱-۱۹ مسئلهٔ ظاهراً لاینحلی ارائه می‌دهد. نقشهٔ پراشی از این نوع برای اولین بار در ۱۹۸۴ در یک نمونه آلیاژی Al/Mn مشاهده شد، که از فاز مذاب با آن چنان سرعتی سرد شده بود که اولین ساختار جامد تشکیل شده در آن "منجمد" شده بود. متعاقباً نقشه‌های مشابهی برای مواد دیگر نیز دیده شده‌اند. وجود چنین لکه‌های واضحی در نقشهٔ پراش نشانگر یک ترتیب اتمی بسیار منظم است، که احتمالاً دارای ساختارهای صفحه‌ای موازی است که توانایی پراکندگی همدوس پرتوهای X را دارند. ولی نقشهٔ شکل ۱-۱۹ داری یک محور تقارن ده تایه است، و این نشانگر آن است که ساختار اتمی نیز باید تقارن مشابهی را دارا باشد،[۱] به این ترتیب یکی از قضایای بنیادی بلورشناسی که به موجب آن هر شبکه به شکل معادلهٔ (۱-۲) تنها می‌تواند محورهای تقارن یکتایه، دو تایه، سه تایه، چهارتایه و شش تایه داشته باشد نقض می‌شود. محور تقارن ده تایه نیز اساساً به همان دلیل در سیاهه وارد نمی‌شود چون، همان گونه که از شکل ۱-۲۰ پیداست، نمی‌توان یک سطح دو بعدی را با کنار هم چیدن کاشی‌های به شکل ده ضلعی منظم، مفروش کرد. چون موادی که نقشهٔ پراش نظیر شکل ۱-۱۹ را به وجود می‌آورند خواص ناوردائی انتقالی مورد انتظار در بلورها را دارا نیستند با عنوان ***شبه بلورها*** خوانده می‌شوند.

هنگامی که نقشه‌های پراش با زوایای فرودی مختلف مورد نظر قرار گیرند، روشن می‌شود که شبه بلورها غالباً تقارنی همانند بیست وجهی نشان داده شده در شکل ۱-۲۱ (الف) دارند. این شکل ۲۰ رخ دارد که هر کدام یک مثلث متساوی الاضلاع است. خط AA یکی از

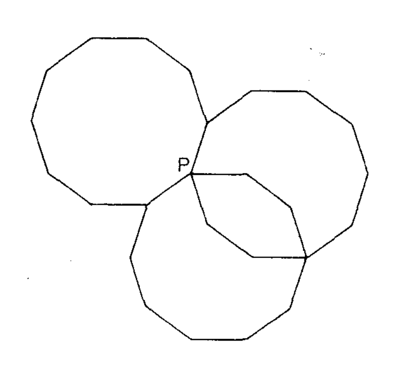


شکل ۱-۱۹: نقشهٔ پراش با تقارن ده تایه حاصله از آلیاژی از جنس (۸۶ درصد) Al- (۱۴ درصد) Mn که به سرعت سرد شده است[۲].

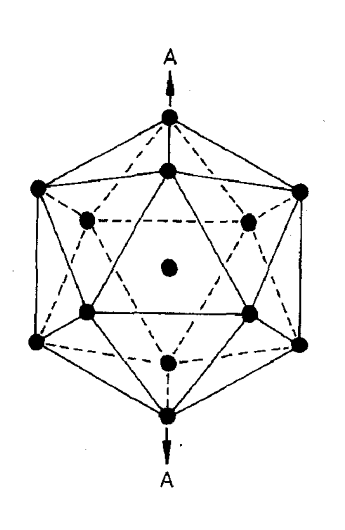
۱- متعاقباً تصاویر بزرگ شدهٔ شبه بلورکها مشاهده شده‌اند که وجود محور تقارن ده تایه را تأیید می‌کنند

۲- این نتایج با کسب مجوز از مرجع زیر اقتباس شده است

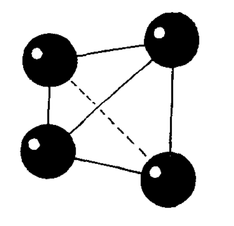
D.Schechtman et.al Phys. Rev. lett. 53,1951 (1984)



شکل ۱-۲۰: سه ده ضلعی منظم مشترک در یک راس، P، عدم امکان مفروش کردن یک سطح دو بعدی با یاخته‌های یکه‌ای به این شکل را نمایش می‌دهد.



(الف) بیست وجهی: خط AA یکی از شش محور تقارن پنج تایه‌ای است که از ۱۲ راس می‌گذرند.



(ب) ترتیب چهار وجهی اتمها؛ اگر ۲۰ چهار وجهی اندکی واپیچیده در یک رأس مشترک باشند ترتیب بیست وجهی اتمها (الف) حاصل می‌شود.

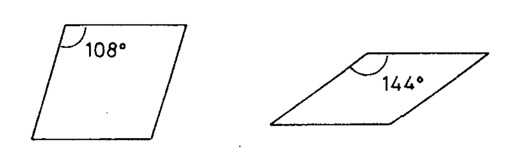
شکل ۱-۲۱

شش محور تقارن پنج تایهٔ بیست وجهی است که به تقارن ده تایه در نقشهٔ پراش منجر می‌شود. اگر در تلاش برای تنگ هم چینی به جای صفحهٔ تنک پکیدهٔ شکل ۱-۷ ترتیب چهار وجهی

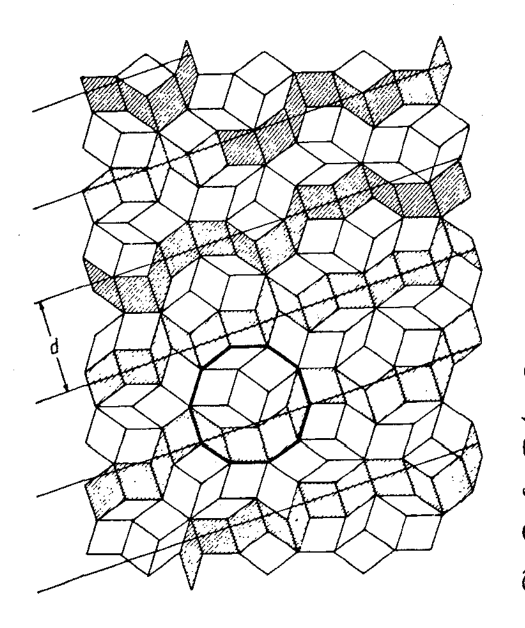
اتمها نظیر شکل ۱-۲۱ (ب) به عنوان سنگ بنای اصلی در نظر گرفته شود ترتیب بیست وجهی اتمها به صورت کاملاً طبیعی حاصل خواهد شد. با اجازه دادن به ۲۰ چهار وجهی که در یک راس اشتراک پیدا کنند این بیست وجهی شکل می‌گیرد. برای حصول این امر هر چهار وجهی باید اندکی تغییر شکل دهد؛ فاصلهٔ هر اتم تا نزدیکترین همسایگان آن بر روی سطح بیست وجهی حدود ۵٪ بیش از فاصلهٔ آن تا اتم مرکزی است. همین ویژگی است که از حصول تنک پکیدگی بلندبرد با کنار هم چینی چهار وجهی‌ها به سوی خارج از راس مشترک مرکزی جلوگیری می‌کند. در تمامی بلورهای با یک ترتیب موضعی بیست وجهی از اتم‌ها که تا قبل از ۱۹۸۴ کشف شدند با به کارگیری اتم‌های اضافی به گونه‌ای که مجدداً ساختاری با ناوردایی انتقالی ایجاد شود واپیچیدگی را برطرف کرده بودند.

عموماً این باور وجود دارد که با تعمیم نقشهٔ مفروش کردن با کاشی در دو بعد شکل ۱-۲۲، که توسط راجر پنروز در ۱۹۷۴ ابداع شد، به سه بعد، درک ساختار شبه بلورها حاصل خواهد شد. در روش مفروش کردن پنروز، به جای کنار هم چینی یاخته‌های یکهٔ متوازی الاضلاعی یکسان، که یک شبکهٔ بلوری دو بعدی نظیر شکل ۱-۱ (ب) را می‌سازد، از دو نوع سنگ بنای شکل ۱-۲۲ (الف) استفادهٔ می‌شود. هر دو نوع کاشی اصلی مانند یاختهٔ یکهٔ شبکهٔ لوزی در شکل ۱-۴ (ج) لوزی‌اند، ولی مقادیر زاویهٔ γی آنها 144° و 108° است. در نقشه (شکل ۱-۲۲ (ب)) تعداد دفعاتی که لوزی‌های با زاویه 144° ظاهر می‌شوند دقیقاً $(\sqrt{5}+1)/2$ برابر تعداد دفعاتی است که لوزی‌های با زاویهٔ 108° پدیدار می‌شوند. این نقشه، علی‌رغم فقدان ناوردایی انتقالی، حاوی ده ضلعی‌های منظم با سمتگیری یکسان و نیز مجموعه‌هایی از خطوط تقریباً مستقیم است که با هم زاویهٔ 72° می‌سازند و می‌توانند نقشهٔ پراش با تقارن پنج تایه را ارائه نمایند. (شکل ۱-۲۲ (ب) یک مجموعه از این خطوط را نشان می‌دهد). کاشی کاری سه بعدی پنروز را می‌توان با به کاربردن دو یاختهٔ لوزی رخ متفاوت (مکعب‌های فشرده شده) به عنوان سنگ بناها به دست آورد. اما اگرچه احتمال دارد که ساختار شبه بلورها را بتوان به این طریق توصیف کرد ولی هنوز هیچ تعیین ساختار بدون ابهامی از این دست صورت نگرفته است.

مشکلات موجود برای توضیح ساختار شبه بلورها از فقدان ناوردائی انتقالی ناشی می‌شود، و در اینجا مناسب است که بر میزان مفید بودن این ویژگی برای بلور شناسان و فیزیکدانان حالت جامد تأکید شود. در مورد یک بلور با ناوردایی انتقالی برای تعیین مکان تمامی اتمهای بلور تنها لازم است مکان و سمتگیری یک یاخته یکّه را مشخص کرد. این ویژگی تا به آن حد ارزشمند است که یک رهیافت نظری در مورد شبه بلورها عبارت از بررسی امکان این بوده است که آیا می‌توان شبه بلورها را توسط یک شبکه ناوردای انتقالی در یک فضای شش بعدی نمایش



(الف) دو سنگ بنای لوزی



(ب) نقشه حاوی ده ضلعی‌های منظم، همگی با سمتگیری یکسان، و مجموعه‌های ساختارهای خطی موازی با زاویه 72° نسبت به یکدیگر (تنها یک مجموعه در شکل نشان داده شده است) است، که می‌تواند نقشهٔ پراش با تقارن پنج تایه را بدهد.*

شکل ۱-۲۲: کاشی کاری پنرز

داد؛ در این صورت ساختار واقعی بر روی یک "سطح" سه بعدی در این فضا دیده می‌شود!**

۱-۶ نیروهای بین اتمی

انرژی پیوندی اتم در تمام جامدها از کاهش انرژی الکترون‌های اتمی به علت نزدیک شدن به اتمهای مجاور نتیجه می‌شود. برای ارائه یک توصیف کمّی لازم است حالتهای الکترون محاسبه شوند؛ بعضی شواهد در خصوص ماهیت این حالتها و نیز عواملی که بر انرژی پیوند اثر می‌گذارند در فصل‌های ۳ و ۴ ارائه شده‌اند. در این جا برای نیروهای بین اتمی توصیف کیفی

*- این نتایج با کسب مجوز از مرجع زیر اقتباس شده است.

D.R. Nelson, Science 229, 233 (1985), Copyright 1985 by AAAs

** برای اطلاعات بیشتر در مورد شبه بلورها به مقالهٔ زیر مراجعه کنید:

D.R. Nelson, Scientific American, Aug. 1986.

ارائه می‌دهیم که خواننده احتمالاً با بیشتر آن از قبل آشناست. متداول است که پیوندهای بین اتمها را به انواع مختلف دسته‌بندی کنند: وان دروالس، یونی، کووالان، فلزی و پیوندهای هیدروژنی انواعی هستند که در زیر بیشتر بحث شده‌اند. همواره باید به خاطر داشته باشیم که این واژه‌ها مخلوق ذهن بشر است و به منزلهٔ کمک فکر ارائه شده‌اند. **پیوندها جملگی پیامد برهم‌کنش الکتروستاتیکی هسته‌ها با الکترونهای تابع معادلهٔ شرودینگراند.** در بیشتر موارد نیز باید پیوندها را حدواسط انواع فرین توصیف شده در زیر در نظر گرفت.

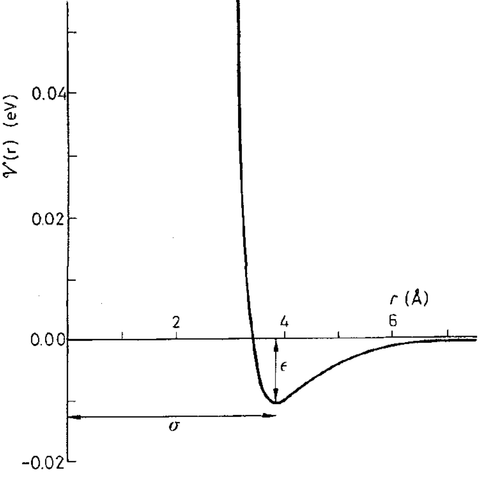
۱-۶-۱ پیوند وان‌دروالس

ساده‌ترین مثالها برای پیوند وان در والس جامدهای گازهای بی‌اثراند. پیکربندیهای الکترونی پوستهٔ پر با تقارن کروی در اتمهای منزوی گاز بی‌اثر بسیار پایدارند و با نزدیک شدن اتمها به یکدیگر برای تشکیل بلور، فقط اندکی تغییر می‌کنند. انرژی برهم‌کنش دو اتم گاز بی‌اثر تنها به فاصلهٔ بین آنها بستگی دارد و با منحنی پتانسیل بین اتمی کاملاً شناخته شدهٔ شکل ۱-۲۳ نمایش داده می‌شود ؛ نیروی بین اتمها برابر منهای شیب این منحنی است. نیروی جاذبه در فواصل زیاد ناشی از آن است که حتی یک اتم با تقارن کروی نیز دارای یک گشتاور دو قطبی الکتریکی در *حال افت و خیز* است؛ این خود یک گشتاور دو قطبی در اتم دیگر القاء می‌کند و سپس این دو قطبیها یکدیگر را جذب می‌کنند. این نیروی جاذبه به نام **نیروی وان در والس** و یا **نیروی لندن** معروف است. نیروی دافعه در فاصله‌های کوتاه مربوط به همپوشانی پوسته‌های الکترونی بیرونی دو اتم است. سهم مهمی از نیروی دافعه ناشی از اصل طردپاولی است، که از اشغال یک حالت کوانتومی توسط دو الکترون جلوگیری می‌کند؛ همپوشانی پوسته‌های پر به آن معناست که الکترونها باید برای رعایت این ضرورت به ترازهای انرژی اتمی بالاتر ارتقاء یابند. نیروی دافعه با افزایش همپوشانی به سرعت افزایش می‌یابد، و این توضیح می‌دهد که چرا اتمهای گازهای بی‌اثر نظیر کره‌های صلب یکدیگر را جذب می‌کنند و ساختار تنک پکیده می‌سازند.

با فرض آن که برهم‌کنش بین هر دو اتم در بلور از یک پتانسیل بین اتمی مطابق شکل ۱-۲۳ حاصل شود، می‌توان انرژیهای پیوند، نیروهای بین اتمی و خواص مربوط به بلورهای گاز بی‌اثر را با دقت معقولی محاسبه کرد. به خواننده ناآشنا با این مباحث توصیه می‌شود که فصل ۳ کتاب فلاورز و مندوزا [۱] را مطالعه کند.

۱-۶-۲ پیوند یونی

وضعیتی مشابه با جامدهای گاز بی‌اثر در جامدهای یونی مانند کلرید سدیم وجود دارد. انتقال یک الکترون از اتم سدیم به اتم کلر موجب پیدایش یون‌های Na^+ و Cl^- به ترتیب با پیکربندی الکترونی پایدار گازهای بی‌اثر نئون و ارگون می‌شود. با نزدیک شدن یونها به



شکل ۱-۲۳ : پتانسیل لنارد جونز برای $\nu(r)=\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}-2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$ برهم کنش دو اتم آرگون وپارامترهای ε و σ که پتانسیل‌رامشخص می‌کنند از اندازه‌گیریها بر روی ارگون گازی حاصل می‌شوند.

یکدیگر برای تشکیل بلور، حالتهای الکترونی اندکی تغییر می‌کنند و برهم کنش هر دو یون داخل بلور را می‌توان با منحنی پتانسیل بین یونی دو یون منزوی نمایش داد. پتانسیل بین یونی در فاصله‌های زیاد عمدتاً ناشی از برهم‌کنش الکتروستاتیکی بلندبرد $\pm\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_\circ r}$ است؛ + برای دو یون هم علامت و − برای یونهای با علامت مخالف است. پتانسیل در فاصله‌های کوتاه، همچون اتمهای گازهای بی‌اثر، عمدتاً ناشی از برهم کنش دافعهٔ وابسته به همپوشانی پوسته‌های الکترونی است.

به کارگیری پتانسیل بین یونی در محاسبهٔ انرژی پیوندی و خواص مربوط در بلورهای یونی نیز در فصل ۳ کتاب فلاورز و مندوزا [۱] بحث شده است.

۱-۶-۳ پیوند کووالان

در بلورهای با پیوندهای کووالان نظیر الماس، سیلسیوم و ژرمانیوم انرژی پیوند به مشارکت الکترونهای ظرفیت در بین اتمها مربوط می‌شود. با نزدیک شدن اتمها برای تشکیل بلور حالتهای الکترونهای ظرفیت تغییر بارزی می‌کنند و هر گاه اتمی بیش از یک پیوند تشکیل دهد انرژی قویاً به سمتگیری نسبی پیوندها وابسته است. لذا گفته می‌شود که پیوندهای کووالان **جهت دار**اند؛ در الماس کمینهٔ انرژی برای اتمهای کربن در وضعیتی رخ می‌دهد که چهار پیوند کووالانی به طرف گوشه‌های یک چهار وجهی منظم نظیر شکل ۱-۱۵ جهت‌گیری نمایند. ما در بخش ۴-۳ رهیافت ساده‌ای برای ساختن توابع موج آزمون الکترون به منظور توصیف پیوندهای کووالان در الماس و دیگر بلورها ارائه خواهیم کرد. ماهیت جهت‌دار

پیوندهای کووالان به این معناست که انرژی یک بلور با این چنین پیوندی را نمی‌توان به صورت جمع ساده پتانسیلهای بین اتمی، زوج اتمهای منزوی نوشت.

از آن جا که یک زوج الکترون لازمهٔ تشکیل هر پیوند کووالان است لذا هر اتم نمی‌تواند به تعداد بیش از الکترونهای ظرفیت خود پیوندهای کووالان تشکیل دهد. به علت وجود تعداد متناهی پیوندها در هر اتم گفته می‌شود که همبستگی کووالان **اشباع پذیر** است. ساختارهای مواد با پیوند کووالان به جای آنکه توسط ملاحظات تنک پکیدگی مشخص شوند، توسط این ویژگی و نیز توسط ماهیت جهت‌دار پیوندها تعیین می‌شوند.

در یک پیوند کووالان ایده‌ال بین دو اتم دو الکترون با سهم یکسان به اشتراک گذاشته می‌شوند. برای تحقق چنین وضعیتی ملاحظات تقارنی پیشنهاد می‌کنند که دو اتم باید همانند باشند. این ویژگی برای نیمرساهای عنصری نظیر Si و Ge وجود دارد ولی در نیمرساناهای ترکیبی نظیر $Ga\,As$، که دارای ساختار بلندروی هستند وجود ندارد (شکل ۱-۱۵)؛ الکترونهای اشتراکی به گونه‌ای توزیع می‌شوند که به عنصر گروه V، یعنی As نزدیک‌تر از عنصر گروه III، یعنی Ga، هستند. در نتیجه ماهیت پیوندهای کووالان در چنین موادی حد واسط یک پیوند کووالان خالص با الکترونهای اشتراکی با سهم مساوی و یک پیوند یونی خالص با انتقال کامل یک الکترون از یک اتم به اتم دیگر است. با بیان گشتاور دو قطبی الکتریکی همراه هر پیوند به صورت کسری از گشتاور دو قطبی یک پیوند یونی خالص مقیاسی برای یونی بودن پیوند به دست می‌آید؛ گشتاور پیوند یونی خالص برابر حاصل ضرب بار الکترونی در فاصله بین اتمی است. نتیجه آن می‌شود که پیوند "کووالان" در $Ga\,As$ برابر با ۳۲٪ گشتاور یونی است، برای مقایسه، پیوند "یونی" در $NaCl$ بر طبق همین معیار در حقیقت ۹۴٪ یونی است.

۱-۶-۴ پیوند فلزی

اتمهای فلز کمتر از چهار الکترون ظرفیت، که برای تشکیل ساختاری با پیوند کووالان در فضای سه بعدی مورد نیاز است، دارند. یک شیوهٔ نگرش به پیوندهای فلزی آن است که آنها را به عنوان گونه‌ای از بستگی کووالان که در آن بعضی از پیوندها وجود ندارد در نظر بگیریم. برای پیوندهای حذف شده ترتیبهای ممکن زیادی وجود دارد و می‌توانیم برای بلور تابع موج حالت پایه‌ای تصور کنیم که خود ترکیب خطی تمامی راههای ممکن حذف کسر معینی از پیوندها باشد. این نحوهٔ نگرش به طور طبیعی به مفهوم عدم جایگزینی الکترونها به گونه‌ای که برای رسانندگی الکتریکی لازم است منجر می‌شود. به روش دیگر، پیوند فلزی را می‌توان به عنوان حالت حدی پیوند یونی که در آن یون‌های منفی همان الکترون‌ها هستند در نظر گرفت. به این ترتیب، کلریدسدیم تعداد مساوی از یون‌های Na^+ و Cl^- دارد و سدیم فلزی تعداد یکسان از Na^+ و e^- دارد. تفاوت

اساسی در آن است که جرم بسیار کوچک الکترون به این معناست که انرژی نقطهٔ صفر آن، چنان بزرگ است که برای ارتعاش با دامنه کوچک حول یک موقعیت ثابت در درون بلور نمی‌تواند جایگزیده شود. کاهش انرژی جنبشی الکترونها در اثر واجایگزیدگی آنها بخش قابل توجهی از انرژی پیوندی را به وجود می‌آورد (بخش ۳-۲-۵). یک ساختار فلزی تا حدود زیادی تنها با پکیده شدن یونهای مثبت تعیین می‌شود؛ شارهٔ الکترونی درست نوعی چسب با بار منفی است. در فصل ۴ برای بحث در مورد حالتهای الکترونی بلورها فرمولبندی‌ای معرفی خواهیم کرد که هر دو نوع فلزی و کووالان را در بر می‌گیرد.

۱-۶-۵ پیوند هیدروژنی

پیوند هیدروژنی از آن رو بروز می‌کند که یک اتم هیدروژن معمولاً به صورت ناحیه‌ای با بار مثبت از یک مولکول است. این اتم می‌تواند توسط جاذبهٔ الکتروستاتیکی با یک ناحیهٔ با بار منفی یک مولکول دیگر (یا همان مولکول) پیوند ضعیفی را تشکیل دهد. پیوند هیدروژنی در یخ و در بسیاری از بلورهای آلی حائز اهمیت است؛ شکل مارپیچی مولکول DNA از پیوند هیدروژنی بین قسمت‌های مختلف یک مولکول طویل ناشی می‌شود.

۱-۶-۶ پیوند مختلط

در یک جامد ممکن است بیش از یک نوع پیوند به طور به همزمان وجود داشته باشد. به عنوان مثال در گرافیت اتمهای کربن در صفحات شش گوشی با پیوندهای کووالان به یکدیگر مربوطند (شکل ۱-۱). حال آن که نیروهای ضعیف تر بین این صفحات اصولاً نظیر نیروهای بین اتمهای گاز بی‌اثرند؛ ضعف نیروهای بین صفحه‌ای سهولت لغزش نسبی آنها را نسبت به یکدیگر توجیه می‌کند و لذا عامل خواص روان سازی در گرافیت است. اینکه گرافیت، برای جریان الکتریکی موازی با این صفحات، رسانای الکتریسته و برای جریان عمود بر این صفحات نارسانااست پیامد دیگری از پیوند مختلط است. در بسیاری از بلورهای آلی نیروی بین مولکولهای با پیوندهای کووالان اصولاً مشابه نیروهای بین اتمهای گاز بی‌اثرند: در بعضی موارد مولکولها دارای گشتاور دو قطبی الکتریکی دائمی هستند که به پتانسیل جاذبه‌ای منجر می‌شود که به جای $\frac{1}{R^6}$ که از افت و خیز گشتاورهای دو قطبی ناشی می‌شود به صورت $\frac{1}{R^3}$ بروز می‌کند.

مسایل

۱-۱ نشان دهید که در ساختار تنک پکیدهٔ شش گوش حاصل از کره‌های صلب $c/a = (8/3)^{1/2}$

۱-۲ (مانند شکل ۱-۶) چند یاخته یکّه مکعبی را رسم کنید و صفحات شبکه‌ای زیر را روی

شکل مشخص کنید: (۰۰۱)، (۱۰۱)، (۰۱۱)، (۰۲۱)، (۲۱۰)، (۲۱۱)، (۱۲۲).

۱-۳ ثابت کنید در یک شبکهٔ با تقارن مکعبی جهت $[hkl]$ بر صفحهٔ (hkl) با شاخصهای یکسان عمود است.

۱-۴ نشان دهید که در یک شبکه مکعبی با ابعاد a فاصلهٔ d ی بین دسته صفحات شبکه‌ای (hkl)، به قرار زیر

$$d = a/(h^{۲}+k^{۲}+l^{۲})^{۱/۲}$$

(به یاد بیاورید که مجموع مربعات کسینوس‌های هادی خط عمود بر یک صفحه برابر ۱ است.)

۱-۵ نقشه زیر را در نظر بگیرید:

```
q p   d b   q p   d b   q p   d b   ...
d b   q p   d b   q p   d b   q p   ...
q p   d b   q p   d b   q p   d b
 ⋮     ⋮     ⋮
```

(الف) یک یاخته یکّه مستطیلی را نشان دهید.

(ب) یک یاختهٔ یکّهٔ بسیط را نشان دهید.

(ج) پایهٔ حروف وابسته به هر نقطهٔ شبکه را مشخص کنید.

۱-۶ ساختارهای fcc، bcc، hcp و الماسی را در نظر بگیرید.

(الف) نقشه‌های یاخته یکّهٔ قراردادی این ساختارها را رسم کنید و نشان دهید ارتفاع اتمها کسری از ارتفاع یاخته یکّه است.

(ب) مختصات اتمهای پایه را در هر ساختار مشخص کنید.

(ج) اگر این ساختارها توسط کره‌های مماس برهم ساخته شوند، کسر فضای اشغال شده توسط این کره‌ها را محاسبه کنید.

۱-۷ بلوری دارای پایهٔ تک اتمی به ازای هر نقطهٔ شبکه و مجموعه‌ای از بردارهای انتقالی بسیط به قرار زیر است (برحسب Å):

$$\mathbf{a} = ۳\hat{i} \quad , \mathbf{b} = ۳\hat{j} \quad , \mathbf{c} = ۱/۵(\mathbf{i}+\mathbf{j}+\mathbf{k})$$

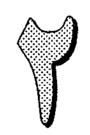
که $\mathbf{i}$، $\mathbf{j}$ و $\mathbf{k}$ بردارهای یکّه در جهت‌های x و y و z در یک دستگاه مختصات دکارتی‌اند. شبکهٔ براوهٔ این بلور از چه نوعی است؟ و شاخص‌های میلر مجموعهٔ صفحات حاوی متراکم‌ترین توزیع اتم‌ها کدامند؟ حجم یاخته‌های یکهٔ بسیط و یکهٔ قراردادی را محاسبه کنید.

۱-۸ برای ساختارهای fcc و bcc امکان انتخاب یاختهٔ یکهٔ بسیطی به شکل لوزی رخ وجود

دارد، یعنی بردارهای انتقال بسیط $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ از نظر بزرگی برابر و زوایای α، β، γ نیز با هم مساوی‌اند. نمودارهایی رسم کنید که $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ برای هر ساختار را نشان دهد. در هر مورد زاویهٔ α را محاسبه کنید.

۱-۹ زاویه براگ برای یک بازتاب معین از یک نمونهٔ پودری مس در دمای ۲۹۳K مساوی °۴۷/۷۵ و در دمای ۱۲۷۳K مساوی °۴۶/۶۰ است. ضریب انبساط گرمایی خطی مس را محاسبه کنید.

من ارتعاشات نیکو را برمی‌گزینم.
او من را تهیج می‌کند.[*]



دینامیک بلور

۲-۱ مقدمه

تصویر ارائه شده از یک بلور در فصل قبل به صورت توزیعی منظم از اتمهای ساکن نمی‌تواند کاملاً صحیح باشد. این تصویر با اصل عدم قطعیت هایزنبرگ که به موجب آن نمی‌توان به طور همزمان و دقیق مکان و اندازه حرکت یک ذره را دانست در تعارض است. لذا، در دمای صفر مطلق، اتمهای یک بلور باید حول مکانهای تعادل خود ارتعاش کنند. انرژی‌ای که این اتمها به دلیل این **حرکت نقطهٔ صفر** دارند انرژی **نقطهٔ صفر** نامیده می‌شود. در دماهای بالاتر همچنانکه اتمها انرژی گرمایی به دست می‌آورند دامنهٔ حرکت افزایش می‌یابد. در این فصل ماهیت حرکت‌های اتمی را، که گاهی ارتعاشات شبکه نامیده می‌شوند مورد بحث قرار می‌دهیم.

نخست محاسبات ما در اصل به ارتعاشات کم دامنهٔ شبکه محدود خواهد بود. از آن جاکه در این صورت جامد به موقعیت تعادل پایدار نزدیک است، لذا حرکت آن را می‌توان با تعمیم روش به‌کار برده شده برای بررسی نوسانگر هماهنگ ساده محاسبه کرد. حد دامنهٔ کوچک **حد هماهنگی** نامیده می‌شود. **آثار ناهماهنگ** که در دامنه‌های بالاتر روی می‌دهد موضوع بخشهای ۲-۷ و ۲-۸ هستند.

وقتی اتمها از مکان تعادل خارج می‌شوند نیروهایی که بر آنها وارد می‌شود حاکم بر حرکتهای اتمی است. این نیروها به طور مشروح باید توسط توابع موج و انرژیهای الکترونهای

---

*- نقل از Beach Boys, 1976 Pop Song

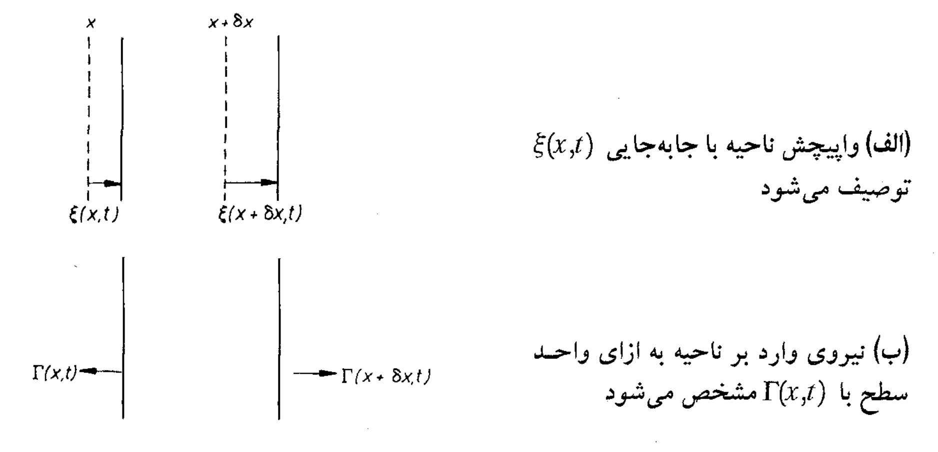
درون بلور تعیین شوند. خوشبختانه بدون انجام این محاسبات می‌توانیم بسیاری از خواص مهم حرکتهای اتمی را استنتاج کنیم.

۲-۲ امواج صوتی

با یادآوری تجربهٔ هر روزهٔ خویش که امواج صوتی در جامدها منتشر می‌شوند، بررسی دینامیک بلوری را شروع می‌کنیم. این تجربه به ما می‌گوید که ارتعاشات موج گونهٔ شبکه با طول موج بلند در مقایسه با فاصلهٔ بین اتمی امکانپذیر است. برای این امواج جزئیات ساختار اتمی بی اهمیت است و انتشار آنها تحت حاکمیت خواص ماکروسکوپی کشسانی بلور است. ما در مورد امواج صوتی بحث خواهیم کرد، زیرا این امواج باید با ارتعاشات شبکه‌ای عامتر که بعداً در همین فصل بررسی می‌شوند، در حد بسامد پایین و طول موج بلند متناظر باشند.

در یک بسامد معین و در یک جهت معلوم در درون بلور امکان تراگسیل سه موج صوتی، با جهت‌های قطبش متفاوت و در حالت کلی با سرعتهای مختلف وجود دارد. برای صوتی که در جهتی با تقارن بالا مانند [۱۰۰] در یک بلور با تقارن مکعبی حرکت می‌کند یکی از این امواج قطبیدهٔ **طولی** است و دو موج دیگر قطبیدهٔ **عرضی**‌اند که در جهتهای متقابلاً عمودند. برای امواجی که در جهت [۱۰۰] حرکت می‌کنند دو موج عرضی سرعت یکسان دارند.

برای روشن شدن روش محاسبهٔ سرعت امواج صوتی فرض می‌کنید که یک موج طولی در امتداد محور x در حرکت است. جزئی از بلور را که قبل از رسیدن موج به آن بین صفحات x , $x+\delta x$ قرار دارد در نظر می‌گیریم. فرض کنید با انتشار موج صفحهٔ x به‌گونه‌ای که در شکل ۲-۱ (الف) نشان داده است به اندازهٔ $\xi(x,t)$ جابه‌جا شود. صفحه $x+\delta x$ به مقدار $\xi(x+\delta,t)$



شکل ۲-۱: اثر عبور یک موج صوتی قطبیدهٔ طولی که در راستای x حرکت می‌کند بر ناحیه‌ای از بلور در فاصلهٔ صفحات x و $x+\delta x$

جابه‌جا می‌شود که اگر δx در مقایسه با طول موج کوچک باشد می‌توان آن را به صورت $\xi(x,t)+\left(\frac{\partial \xi}{\partial x}\right)\delta x$ نوشت. بنابراین کشیدگی جزء δx مساوی $(\partial\xi/\partial x)\partial x$ و کرنش (= کشیدگی / طول اولیه) تحمیل شدهٔ بر این جز درست برابر $\frac{\partial \xi}{\partial x}$ است. بنابر قانون هوک (کرنش متناسب با تنش) تنش متناظر Γ (نیرو به ازای واحد سطح) به قرار زیر است

$$\Gamma = C\frac{\partial \xi}{\partial x} \tag{۱-۲}$$

که C مدول کشسانی است. قابل توجه آن که C کاملاً همان مدول یانگ نیست چون متضمن کشیدگی جزء δx به صورتی است که از انقباض جانبی جلوگیری می‌شود حال آن که در مورد مدول یانگ هیچ محدودیت جانبی اعمال نمی‌شود. برای امواج طولی با طول موج کوتاه در مقایسه با ابعاد بلور بقیهٔ ماده از انقباض جانبی جلوگیری می‌کند.

برای محاسبه حرکت جزء δx بلور همان‌گونه که در شکل ۲-۱ (ب) نشان داده شده است باید تغییر کوچک Γ در دو انتهای این جزء را به حساب آوریم. اگر δx در مقایسه با طول موج کوچک باشد نیروی خالص به ازای واحد سطح، $d\Gamma$، را می‌توان به صورت $\left(\frac{\partial \Gamma}{\partial x}\right)\delta x$ نوشت، و لذا معادلهٔ حرکت این جزء به قرار زیر است

$$\text{نیرو} = \frac{\partial \Gamma}{\partial x}\delta x = \text{جرم} \times \text{شتاب} = \rho\ \delta x\frac{\partial^{2} \xi}{\partial t^{2}}$$

که در آن ρ چگالی جرمی بلور است. با استفاده از معادلهٔ (۲-۱) در مورد تنش، این معادله را می‌توان چنین نوشت

$$\frac{C}{\rho}\ \frac{\partial^{2}\xi}{\partial x^{2}} = \frac{\partial^{2}\xi}{\partial t^{2}} \tag{۲-۲}$$

که این معادله موج مربوط به امواج طولی با سرعت زیر است.

$$v_L = \left(\frac{C}{\rho}\right)^{1/2} \tag{۳-۲}$$

سرعت یک موج صوتی را می‌توان همواره به این صورت نوشت، با یک مدول کشسانی C که به طور کلی به جهتهای انتشار و قطبش وابسته است. سرعت امواج صوتی در جامدها از مرتبهٔ $1000\,ms^{-1}$ است.

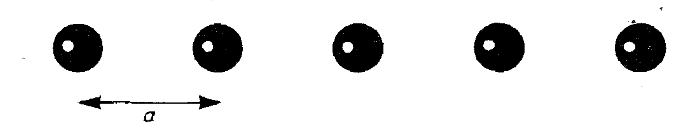
فرمولبندی ما برای انتشار موج صوتی تنها در صورتی معتبر است که δx بسیار کوچکتر از طول موج λ و بسیار بزرگتر از فاصلهٔ اتمی a باشد. در بایست دوم برای به کارگیری خواص کشسانی ماکروسکوپی مورد نیاز است. به این ترتیب محاسبات برای ارتعاشات مهم شبکه که طول موجی قابل مقایسه با فاصلهٔ اتمی دارند معتبر نیست. ولی می‌توانیم با کاربردن سرعت نوعی موج صوتی $1000\,ms^{-1}$ و طول موج نوعی $3\,\text{Å}$ بسامد این ارتعاشات را برابر $3\times10^{12}\,Hz$ برآورد کنیم. این نتیجه پیشنهاد می‌کند که ارتعاشات شبکه مسئول جذب قوی تابش الکترومغناطیسی با بسامدهایی از این مرتبه که در قسمت فروسرخ قرار دارند توسط بعضی از جامدها هستند، (بخش ۹-۱-۴ را ببینید). در بخش بعد بلور بسیار ساده‌ای را، که برای

آن امکان تعمیم محاسبات فوق برای ارتعاشات با طول موجی قابل مقایسه با فاصله بین اتمی وجود دارد، در نظر می‌گیریم.

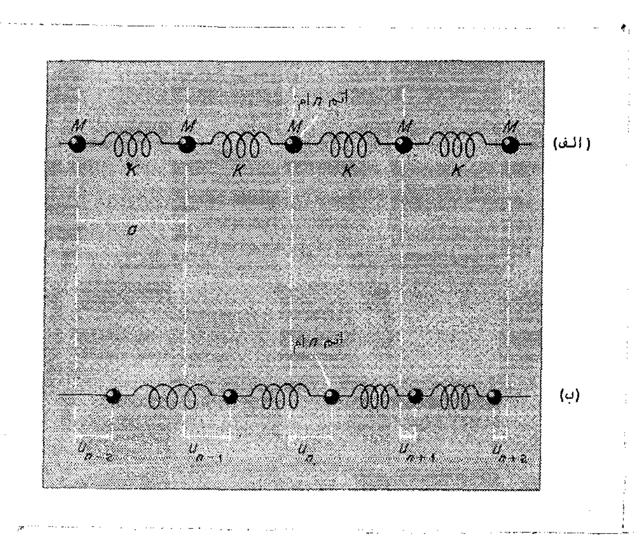
۲-۳ ارتعاشات شبکه در بلورهای یک بعدی

۲-۳-۱ زنجیری از اتمهای یکسان

زنجیر یک بعدی از اتمهای یکسان با فاصلهٔ شبکهٔ ترازمند a که در شکل ۲-۲ نشان داده شده است ساده‌ترین بلورهاست. فرض می‌کنیم که اتمها تنها بتوانند در جهت موازی با زنجیر حرکت کنند و از طریق یک پتانسیل بین اتمی به صورتی که در شکل ۱-۲۳ نشان داده شده است برهم کنش کنند، و نیروی بین آنها به قدری کوتاه برد باشد که فقط نیروهای نزدیک‌ترین همسایگان حائز اهمیت باشند. در این حد، همان گونه که اکنون نشان خواهیم داد، حرکتهای کم دامنهٔ زنجیر اتمها همانند حرکت جرمهای یکسان M است که با فنرهای یکسان با ثابت K، نظیر شکل ۲-۳



شکل ۲-۲ بلور یک بعدی شامل یک زنجیر از اتمهای یکسان



شکل ۲-۳ زنجیری از جرمهای یکسان M که با فنرهایی به یکدیگر متصل شده‌اند: (الف) در فاصله‌های ترازمند $x_n^\circ = na$؛ (ب) در مکانهای جابه‌جا شده $x_n = na + u_n$

به یکدیگر متصلند. برهم کنش $V(r)$ بین نزدیک‌ترین همسایگان به فاصلهٔ r را می‌توان، به ازای انحراف اندک r از مقدار ترازمند آن a، حول $r=a$ به صورت یک سری تیلور بسط داد. لذا

$$V(r) = V(a) + \frac{(r-a)^{۲}}{۲} \left(\frac{d^{۲}V}{dr^{۲}}\right)_{r=a} + \cdots$$

از آن جا که مشتق اول V باید در فاصلهٔ ترازمند که در آن V کمینه است، صفر شود لذا جمله خطی برحسب $r-a$ در سری تیلور ظاهر نمی‌شود. اگر از جملات با مرتبهٔ بالاتر چشم‌پوشی شود (این همان حد هم آهنگ است که در مقدمهٔ این فصل به آن اشاره شد)، رابطهٔ (۲-۴) نظیر انرژی پتانسیل یک فنر با ثابت فنر زیر به نظر می‌رسد

$$K = \left(\frac{d^{۲}V}{dr^{۲}}\right)_{r=a} \quad \textbf{(۲-۵)}$$

ثابت فنر را به سادگی می‌توان به مدول کشسانی C در بلور یک بعدی مربوط کرد. برای این کار نیروی لازم برای افزایش فاصلهٔ بین اتمی از a تا r را به صورت $C(r-a)/a$ می‌نویسیم (یعنی، نیرو = مدول کشسانی × کرنش) مدل شکل ۲-۳ نیروی $K(r-a)$ را پیش بینی می‌کند و رابطهٔ زیر بین C و K به دست می‌آید

$$C = Ka \quad \textbf{(۲-۶)}$$

اینک به محاسبهٔ ارتعاشات شبکه زنجیر یک بعدی شکل ۲-۳ می‌پردازیم. این شبکه عموماً بسیاری از ویژگیهای کیفی مهم ارتعاشات شبکه را نمایش می‌دهد. قوانین مکانیک کلاسیک را به کار خواهیم برد و بحث در مورد تفاوت نتایج حاصل از محاسبات مکانیک کوانتومی را تا قسمت ۲-۵ به تعویق می‌اندازیم. فرض خواهیم کرد که زنجیر حاوی تعداد زیادی اتم است و آخرین اتم به اولین آنها به گونه‌ای متصل است که یک حلقه ساخته شود. این فرض نهایی ابزار ساده‌ای است برای بی‌پایان ساختن زنجیر، به گونه‌ای که تمامی اتمها از شرایط محیطی یکسان برخوردار گردند، و بر مسئله زنجیر طویل، که آثار مرزی به هر حال در آن نقشی ندارد، هیچ تأثیر مهمی ندارد.

اگر جابه‌جایی اتمها از مکان ترازمند آنها، آن گونه که در شکل ۲-۳ نشان داده شده است، U_n باشد، نیروی وارد بر اتم nام شامل جمله‌های زیر است:

(۱) $K(U_n - U_{n-۱})$ به طرف چپ، از طرف فنر سمت چپ آن؛ و

(۲) $K(U_{n+۱} - U_n)$ به طرف راست، از طرف فنر سمت راست آن.

با مساوی قرار دادن نیروی کل به طرف راست، (۱) - (۲)، با حاصل ضرب جرم در شتاب داریم

$$M\ddot{U}_n = K(U_{n+۱} - ۲U_n + U_{n-۱}) \quad \textbf{(۲-۷)}$$

معادلات حرکت تمامی اتمها به همین شکل است، تنها مقدار n تغییر می‌کند. برای حل

معادلات (۲-۷)، جواب موج گونه‌ای را که در آن تمام اتمها با دامنهٔ یکسان A نوسان می‌کنند می‌آزماییم. لذا قرار می‌دهیم*

$$U_n = Aexp\left[i\left(kx_n - \omega t\right)\right] \qquad (۸-۲)$$

که $x_n = na$ مکان جابه‌جا نشدهٔ اتم nام است، به دست می‌آوریم

$$-\omega^۲ MA\, e^{i\,(kna-\omega t)} = KA(e^{i\,[k\,(n+۱)\,a-\omega t]} - ۲e^{i\,(kna-\omega t)} + e^{i\,[k\,(n-۱)a-\omega t]}$$

یا با حذف $Ae^{i\,(kna-\omega t)}$ از هر عبارت داریم،

$$-\omega^۲ M = K(e^{ika} - ۲ + e^{-ika})$$
$$= ۲K\,[cos\,(ka) - ۱]$$

بنابراین

$$\omega^۲ M = ۴K\,sin^۲\left(\frac{۱}{۲}\,ka\right). \qquad (۹-۲)$$

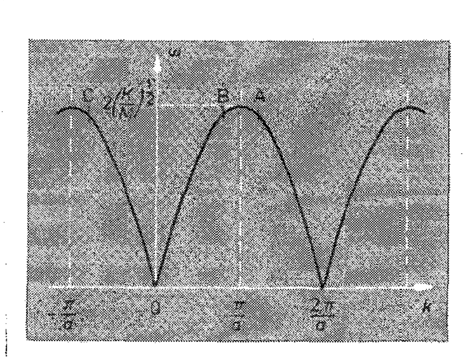
شکل ۲-۴ رابطهٔ پاشندگی (رابطهٔ بین بسامد ω و عدد موج k) برای ارتعاشات موج گونهٔ شبکه ما را نشان می‌دهد که با معادله (۲-۹) داده شده است. مقدار بیشینه $sin\left(\frac{۱}{۲}ka\right)$ برابر ۱ است، لذا بیشترین بسامد ممکن امواج $۲(K/M)^{۱/۲}$ است. این بسامد را بسامد قطع شبکه می‌نامند.

توجه داریم که n در رابطهٔ (۲-۹) حذف شد به گونه‌ای که معادلات حرکت تمام اتمها به رابطهٔ جبری یکسانی بین ω و k منجر می‌شود. این نشان می‌دهد که تابع آزمون ما برای U_n به راستی یک جواب معادله (۲-۷) است. توجه به این نکته نیز مهم است که ما با معادلات حرکت N نوسانگر هماهنگ **جفتیده** شروع کردیم (معادلات (۲-۷)). اگر یک اتم شروع به ارتعاش کند ارتعاش را با دامنهٔ ثابت ادامه نخواهد داد، بلکه به روش پیچیده‌ای به اتمهای دیگر انرژی منتقل می‌کند؛ ارتعاشات تک تک اتمها، به علت همین تبادل انرژی بین آنها، هماهنگ ساده نیست. از طرف دیگر جواب‌های موجگونهٔ ما نوسانات ناجفتیده‌ای به نام **مدهای بهنجار**اند ؛ هر kای ω ی معینی دارد که از رابطهٔ (۲-۹) به دست می‌آید. و مستقل از دیگر مدها نوسان می‌کند. باید انتظار داشته باشیم که تعداد مدها مساوی N یعنی تعداد معادلاتی که با آنها شروع کردیم باشد؛ ببینیم آیا همین گونه است.

برای این منظور باید تعیین کنیم که در زنجیر یک بعدی ما چه اعداد موجی مجازند. از آن جا که ابتدای زنجیر به انتهای آن وصل و اتم nام همانند اتم $(N+n)$ ام است، لذا تمامی مقادیر مجاز

---

*- طبق معمول وقتی مسائل ارتعاشی را توسط عبارتهای نمایی مختلط حل می‌کنیم، قسمت حقیقی U_n است که از نظر فیزیکی به عنوان جابه‌جایی اتمی تعبیر می‌شود



شکل ۲-۴ بسامدهای مد بهنجار برای زنجیری از اتمهای یکسان. توجه کنید که مدهای با اعداد موج در A، B، C همگی بسامد یکسانی دارند و به جابه‌جایی‌های لحظه‌ای اتمی یکسانی مربوط می‌شوند. به شکل ۲-۵ رجوع کنید. نقطهٔ B ی موج متحرک به طرف راست، نقاط A و C ی موج متحرک به طرف چپ را نمایش می‌دهند.

نیستند. این بدان معناست که موج (۲-۸) باید **شرط مرزی دوره‌ای** را ارضا کند

$$U_n = U_{N+n} \tag{۲-۱۰}$$

که مستلزم آن است که تعداد صحیحی طول موج در طول حلقهٔ اتمها گنجانده شود

$$Na = p\lambda$$

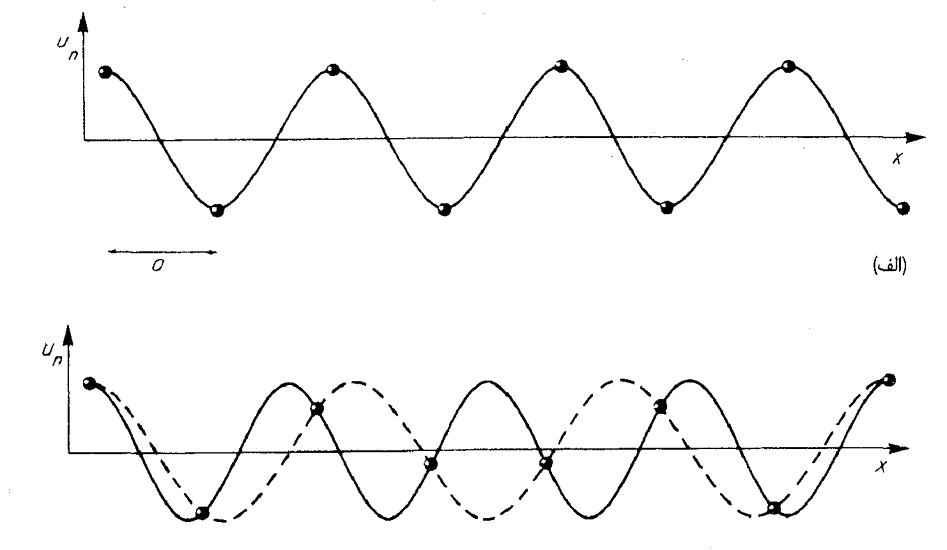
$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{Na} \tag{۲-۱۱}$$

که p عدد صحیحی است. بنابراین N مقدار مجاز K در گسترهٔ $\frac{2\pi}{a}$ مثلاً

$$-\pi/a < k \leq \pi/a.$$

وجود دارد و شکل ۲-۴ نشان می‌دهد که این گسترهٔ محدود k در واقع تمام مقادیر ممکن بسامد ω و سرعت گروه ($\frac{d\omega}{dk}$) را در بر می‌گیرد؛ علاوه بر این، این گستره مدبهنجار را که برای N اتم توقع داریم ارائه می‌دهد. آیا برای اعداد موج در خارج از این گستره هیچ تعبیر فیزیکی‌ای وجود دارد؟

برای درک این موضوع، به جابه‌جایی لحظه‌ای اتمها در شکل ۲-۵ توجه کنید؛ ما در واقع امواج طولی را بررسی می‌کنیم، ولی جابه‌جایی‌ها در شکل ۲-۵ به صورت عرضی نمایش داده شده‌اند زیرا به این ترتیب مشاهدهٔ طبیعت موج گونهٔ آنها ساده‌تر است. شکل ۲-۵ (الف) جابه‌جایی اتمها برای $k = \frac{\pi}{a}$ که به بسامد بیشینه مربوط است را نمایش می‌دهد؛ اتمهای متوالی در فاز مخالف یکدیگر ارتعاش می‌کنند و امواج در این مقدار k اساساً امواج ایستاده‌اند. نقطهٔ وسط هر فنر ساکن است و بنابراین هر جرم به‌گونه‌ای رفتار می‌کند که گویا توسط دو فنر هر یک با ثابت $2k$ نگه داشته شده است، به این ترتیب بسامد $2(K/M)^{1/2}$ که محاسبه کردیم حاصل می‌شود.



شکل ۲-۵: (الف) جابه‌جاییهای اتمی (که برای وضوح به صورت عرضی نمایش داده شده‌اند) به ازای طول موج $\lambda = ۲a$، عدد موج $k = \frac{\pi}{a}$ (ب) جابه‌جاییهای اتمی برای موجی با $\lambda = \frac{۷a}{۴}$، $k = \frac{۸\pi}{۷a}$، منحنی خط پر، و موجی با $\lambda = \frac{۷a}{۳}$، $k = \frac{۶\pi}{۷a}$، منحنی خط چین، دقیقاً یکسانند.

اکنون جابه‌جاییهای نشان داده شده با خط پر در شکل ۲-۵ (ب) برای k به مقدار اندکی بزرگتر یعنی $\frac{۸\pi}{۷a}$، متناظر با نقطهٔ A در شکل ۲-۴ را در نظر بگیرید. چنین جابه‌جاییهایی را می‌توان با موج بلندتر، موج خط چین در شکل ۲-۵ (ب)، نیز نمایش داد که متناظر با نقاط B و C در شکل ۲-۴ با عدد موج $|k| = \frac{۶\pi}{۷a}$ است. لذا نقاط A، B و C متناظر با جابه‌جاییهای لحظه‌ای اتمی یکسان و همچنین بسامد یکسان‌اند. در B سرعت گروه $\frac{d\omega}{dk} > ۰$، در نتیجه موجی داریم که به طرف راست می‌رود؛ A و C هر دو یک موج متحرک به طرف چپ را نمایش می‌دهند و لذا کاملاً معادل یکدیگرند. مقادیر k برای نقاط A و C به اندازهٔ $\frac{۲\pi}{a}$ با یکدیگر تفاوت دارند بنابراین نتیجه می‌گیریم که افزودن هر مضربی از $\frac{۲\pi}{a}$ به k جابه‌جاییهای اتمی و یا سرعت گروه را تغییر نمی‌دهد و لذا هیچ مفهوم فیزیکی در برندارد. ما تنها نیاز داریم که محدودهٔ $-\pi/a < k \leq \pi/a$ راکه حاوی همان Nمد مورد انتظار است در نظر بگیریم.

بینش عمیق‌تر در مورد ویژگی مقادیر $\pm\pi/a$ برای k، با نوشتن قانون براگ (معادله (۱-۳))

برای بلور یک بعدی حاصل می‌شود:

$$n\lambda = n2\pi/k = 2d\sin\theta = 2a$$

یا

$$k = \pi n/a, \qquad (۱۲-۲)$$

که همان گونه که برای امواج متحرک در امتداد زنجیر یک بعدی مناسب است $\theta = 90^\circ$ و $d=a$ را در نظر گرفته‌ایم. به این ترتیب امواج با $k = \pm\frac{\pi}{a}$ بازتاب براگ را پیدا می‌کنند. نقشهٔ موج ایستاده‌ای که به ازای این دو مقدار k روی می‌دهد را می‌توان ناشی از بازتاب براگ امواج متحرک تصور کرد.

توجه داریم که در حد طول موج بلند، $ka \ll 1$، رابطهٔ (۲-۹) به صورت زیر ساده می‌شود

$$M\omega^2 = Kk^2a^2$$

در نتیجه امواج در این محدوده بدون پاشندگی‌اند و سرعت گروه و سرعت فاز آنها (ω/k) هر دو مساوی است با

$$v = a\left(\frac{K}{M}\right)^{1/2} \qquad (۱۳-۲)$$

این امواج صوتی با طول موج بلنداند و محاسبهٔ سرعت آنها از روی خواص کشسانی ماکروسکوپی بلور با روش اعمال شده در قسمت قبل، معادلهٔ (۲-۳)، سرعت را به قرار زیر می‌دهد

$$v_S = (C/\rho)^{1/2} \qquad (۱۴-۲)$$

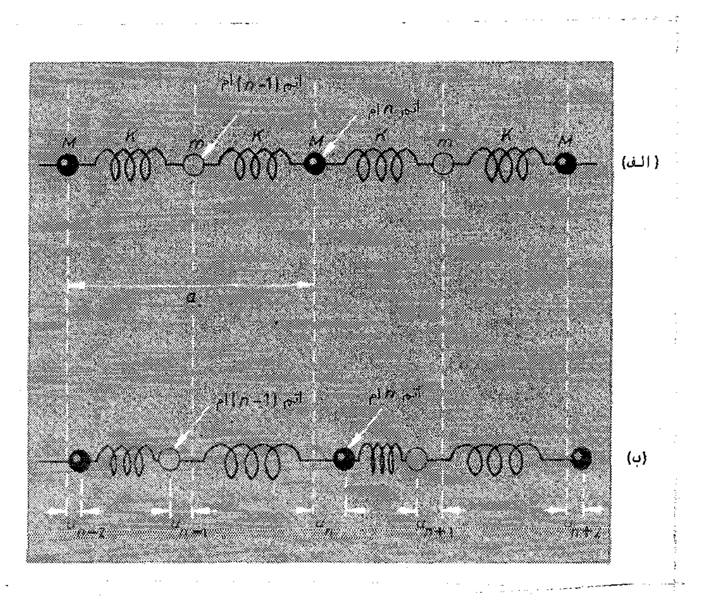
که در آن $\rho(=M/a)$ و C به ترتیب جرم واحد طول و مدول کشسانی بلور هستند. با به کارگیری رابطهٔ (۲-۶) یکسان بودن معادله‌های (۲-۱۲) و (۲-۱۴) را تأیید می‌کنیم و به این ترتیب محاسبه عامتر ما برای ارتعاشات شبکه در حد طول موجهای بلند جواب صحیح می‌دهند. توجه کنید که بلور یک بعدی به دلیل دارا بودن تنها یک جهت ممکن انتشار و یک جهت قطبش فقط یک سرعت صوت دارد. با داشتن سرعت صوت و فاصلهٔ شبکه‌ای می‌توانیم رابطهٔ پاشندگی را برای این بلور ساده رسم کنیم. این نتیجه‌گیری مؤید کلامی است که در مقدمه این فصل آمد مبنی بر آن که بسیاری از ویژگی‌های ارتعاشات شبکه را می‌توان بدون آگاهی مبسوط از نیروهای بین اتمی استنتاج کرد.

وارد کردن فقط نیروهای نزدیکترین همسایگان در محاسبات بسیار محدود کننده به نظر می‌رسد. این کار گرچه برای جامدهای گازهای بی‌اثر تقریب خوبی نیست ولی برای بسیاری از جامدها فرض خوبی است. آثار ناشی از حذف این محدودیت را می‌توان با به کارگیری مدلی که در آن هر اتم با فنرهای دارای ثابت‌های غیر متفاوت به همسایگان واقع در فاصله‌های متفاوت

وصل شده باشد بررسی کرد (مسئلهٔ ۲-۱ را ببینید). با انجام این روند بسیاری از ویژگیهای محاسبهٔ فوق حفظ می‌شود. جواب موجی معادلهٔ (۲-۸) بازهم در معادلات حرکت صدق می‌کند. شکل تفصیلی رابطهٔ پاشندگی تغییر می‌کند ولی ω بازهم یک تابع دوره‌ای از k با دورهٔ $\frac{2\pi}{a}$ است و سرعت گروه در $k=\pm\frac{\pi}{a}$ صفر می‌شود. کماکان N مد بهنجار متمایز وجود دارد که می‌توان آنها را توسط N مقدار مجاز k در گسترهٔ $-\pi/a < k \leq +\frac{\pi}{a}$ مشخص کرد. علاوه بر آن حرکت در طول موجهای بلند متناظر است با امواج صوتی با سرعتی که از معادلهٔ (۲-۱۴) به دست می‌آید.

۲-۳-۲ زنجیری با دو نوع اتم

حال ارتعاشات شبکه در زنجیر حاوی دو نوع اتم به جرمهای m و M که با فنرهای یکسان با ثابت فنر K مطابق شکل ۲-۶ به یکدیگر وصل شده‌اند را مورد بررسی قرار می‌دهیم. این ساده‌ترین مدل ممکن برای یک بلور یونی است، هر چند در نظر گرفتن فقط نیروی بین نزدیکترین همسایگان، که تلویحاً در این مدل وجود دارد، به دلیل بلندبرد بودن برهم کنش کولنی بین یونها برای بلورهای یونی تقریب ضعیفی است، ویژگیهای کیفی مهم ارتعاشات شبکه در بلورهای یونی را ارائه می‌کند. در بخش ۹-۱-۴ تغییراتی را که با در نظر گرفتن آثار بلندبرد نیروهای کولنی در ارتعاشات شبکه به وجود می‌آید مورد بحث قرار می‌دهیم.



شکل ۲-۶ زنجیری حاوی دو نوع جرم نابرابر که با فنرهایی به هم متصل شده‌اند: (الف) در مکانهای ترازمند $x_n^0 = na/2$: (ب) در مکانهای جابه‌جا شده $x_n = \frac{na}{2+u_n}$. همان‌گونه که در شکل نمایش داده شده است a طول یاخته یکه است.

برای تأکید بر حرکتهای پیچیده‌تری که ممکن است در مواردی که بیش از یک نوع اتم وجود دارد پیش آید در شکل ۲-۶ (ب) یک پیکربندی که در آن دو نوع اتم در جهتهای مخالف یکدیگر جابه‌جا شده‌اند را نشان می‌دهیم. توجه کنید که a را به عنوان طول یاختهٔ یکّهٔ بلور (فاصلهٔ شبکه) به کار می‌بریم؛ و فاصلهٔ نزدیکترین همسایگان در اتمهای جابه‌جا نشده $\frac{a}{۲}$ است.

معادلات حرکت را می‌توان همانند معادلهٔ (۲-۷) نوشت با این تفاوت که در این حالت دو نوع معادلهٔ متمایز از یکدیگر وجود دارد، یکی برای جرمهای M به صورت

$$M\ddot{U}_n = K(U_{n+۱} - ۲U_n + U_{n-۱}) \qquad (۲\text{-}۱۵)$$

و دیگری برای جرمهای m به صورت

$$m\ddot{U}_{n-۱} = K(U_n - ۲U_n + U_{n-۱}). \qquad (۲\text{-}۱۶)$$

برای جرمهای M مانند گذشته می‌توانیم جوابی به صورت (۲-۸) فرض کنیم یعنی

$$U_n = Aexp\left[i\,(kx_n^\circ - \omega t)\right]$$

که در آن $x_n^\circ = \frac{na}{۲}$ مکان جابه‌جانشدهٔ اتمی است. در این جا یک کمیت مجهول اضافی یعنی دامنه و فاز نسبی ارتعاشات دو نوع اتم، نیز وجود دارد؛ که با در نظر گرفتن جواب زیر برای جرمهای m آن را نیز منظور می‌کنیم

$$U_n = \alpha Aexp\left[i\,(kx_n^\circ - \omega t)\right] \qquad (۲\text{-}۱۷)$$

که در آن α عدد مختلطی است که دامنه و فاز نسبی را ارائه می‌کند.

با نشاندن در معادلات (۲-۱۵) و (۲-۱۶) به دست می‌آوریم.

$$-\omega^۲ M e^{i(kna/۲ - \omega t)} = k\left(\alpha e^{i[k(n+۱)a/۲ - \omega t]} - ۲e^{i(kna/۲ - \omega t)} + \alpha e^{i[k(n-۱)a/۲ - \omega t]}\right)$$

و

$$-\alpha\omega^۲ m e^{i[k(n-۱)\omega/۲ - \omega t]} = K\left(e^{i(kna/۲ - \omega t)} - ۲\alpha e^{i[k(n-۱) - \omega t]} + e^{i[k(n-۲)\alpha/۲ - \omega t]}\right)$$

یا، با حذف عوامل مشترک مانند قبل داریم،

$$-\omega^۲ M = ۲K\left[\alpha\cos\left(\frac{۱}{۲}ka\right) - ۱\right] \qquad (۲\text{-}۱۸)$$

$$-\alpha\omega^۲ m = ۲K\left[\cos\left(\frac{۱}{۲}ka\right) - \alpha\right]$$

بنابراین در این حالت به جای یک معادلهٔ جبری برای ω بر حسب K، دو معادلهٔ جبری برای α و

ω برحسب K داریم. این حقیقت که n در معادلات (۲-۱۸) ظاهر نمی‌شود همچون گذشته نشانگر آن است که جواب فرضی ما دارای شکل صحیحی است. معادلات (۲-۱۸) را می‌توان به شکل زیر نیز باز نوشت.

$$\alpha = \frac{2K\cos(\frac{1}{2}ka)}{2K - \omega^2 m} = \frac{2K - \omega^2 M}{2K\cos(\frac{1}{2}ka)} \qquad (۲-۱۹)$$

که از آن یک معادله درجهٔ دو برحسب ω^2 به دست می‌آوریم،

$$mM\omega^4 - 2K(M+m)\omega^2 + 4K^2\sin^2(\frac{1}{2}ka) = 0, \qquad (۲-۲۰)$$

جوابهای این معادله عبارتند از :

$$\omega^2 = \frac{K(M+m)}{Mm} \pm K\left[\left(\frac{M+m}{Mm}\right)^2 - \frac{4}{Mm}\sin^2(\frac{1}{2}ka)\right]^{1/2} \qquad (۲-۲۱)$$

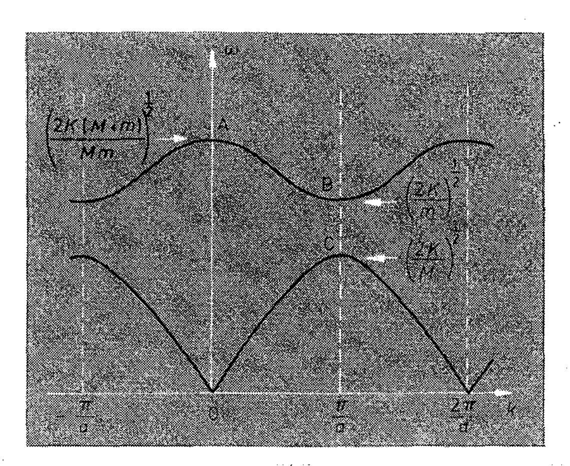
دو ریشه در شکل ۲-۷ رسم شده‌اند. از آن جا که به ازای هر مقدار k دو جواب برای ω وجود دارد گفته می‌شود رابطهٔ پاشندگی دارای دو شاخه است و دو شاخهٔ بالا و پایین در شکل ۲-۷ به ترتیب به علامت‌های + و − در معادلهٔ (۲-۲۱) مربوط می‌شوند. می‌بینیم که در زنجیرهای حاوی دو نوع اتم نیز مانند زنجیرهای تک اتمی خاصیت دوره‌ای بودن روابط پاشندگی برحسب k، با دورهٔ (طول یاختهٔ یکه) / $2\pi = \frac{2\pi}{a}$ برقرار است: این نتیجه برای زنجیر شامل هر تعداد دلخواه اتم در یاختهٔ یکّه معتبر باقی می‌ماند.

اگر بلور دارای N یاختهٔ یکّه باشد، انتظار داریم که $2N$ مد ارتعاشی بهنجار بیابیم چرا که تعداد کل اتم‌ها و در نتیجه تعداد کل معادلات حرکت برابر $2N$ است (معادلات (۲-۱۵) و (۲-۱۶)). اتصال دو انتهای بلور برای تشکیل یک حلقه ایجاب می‌کند که جابه‌جایی‌های اتمی شرط مرزی دوره‌ای $U_n = U_{2N+m}$ را ارضاء کنند، و این به همان عبارت مربوط به مقادیر مجاز k در مورد بلور تک اتمی منجر می‌شود

$$k = \frac{2\pi p}{Na}$$

به این ترتیب در این حالت نیز دقیقاً N مقدار مجاز k در گسترهٔ $\frac{-\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$ وجود دارد؛ بازهم همانند بخش قبل، افزودن هر مضربی از $\frac{2\pi}{a}$ به k جابه‌جایی اتم‌ها را تغییر نمی‌دهد، و نتیجه می‌گیریم که تمامی حرکتهای مجاز را می‌توان با مقادیر k در این گستره توصیف کرد. بنابراین دو شاخهٔ رابطهٔ پاشندگی همان گونه که باید $2N$ مد بهنجار در بردارند.

آزمودن جوابهای حدی معادلهٔ (۲-۲۱) در نزدیکی نقاط O، A، B و C در شکل ۲-۷ آموزنده است.



شکل ۲-۷: بسامد مدهای بهنجار یک زنجیر شامل دو نوع اتم. در A، دو نوع اتم با مرکز جرم ساکن در فاز مخالف هم ارتعاش می‌کنند؛ در B، جرم سبکتر m در حال ارتعاش و جرم M ساکن است؛ در C، M در حال ارتعاش و m ساکن است.

برای $ka << ۱$ داریم $sin(\frac{۱}{۲}ka) \approx \frac{۱}{۲}ka$ و

$$\omega^{۲} \approx \frac{K(M+m)}{Mm} \left[۱ \pm \left(۱ - \frac{mM}{(M+m)^{۲}} k^{۲}a^{۲} \right)^{۱/۲} \right]$$

$$\approx \frac{K(M+m)}{Mm} \left[۱ \pm \left(۱ - \frac{mM}{۲(M+m)^{۲}} k^{۲}a^{۲} \right) \right]$$

$$\approx \frac{۲K(M+m)}{Mm} \quad \text{یا} \quad \frac{Kk^{۲}a^{۲}}{۲(M+m)}$$

با جایگذاری این مقادیر ω در معادلهٔ (۲-۱۹) و استفاده از $cos(\frac{ka}{۲}) \approx ۱$ به ازای $ka << ۱$ مقادیر متناظر α را به صورت زیر به دست می‌آوریم

$$\alpha \approx -M/m \quad \text{یا} \quad ۱$$

اولین پاسخ به نقطهٔ A در شکل ۲-۷ مربوط می‌شود. این مقدار α مربوط به وضعیتی است که در آن M و m در فاز متقابل ارتعاش می‌کنند و مرکز جرمشان ساکن است، و لذا بسامد توسط ثابت فنر $۲K$ و جرم کاهش یافتهٔ $M^{*} = \frac{Mm}{(M+m)}$ به دست می‌آید. دومین پاسخ نمایشگر امواج صوتی با طول موج بلند در همسایگی نقطه o در شکل ۲-۷ است؛ هر دو نوع اتم با دامنه و فاز

یکسان ارتعاش می‌کنند و سرعت صوت به قرار زیر است

$$v_S = \frac{\omega}{k} = a\left(\frac{K}{2(M+m)}\right)^{1/2}$$

این سرعت صوت باید با $(C/\rho)^{1/2}$، (معادلهٔ (۲-۱۴))، که از خواص کشسانی ماکروسکوپی بلور پیش‌بینی می‌شود در توافق باشد و با نشاندن مقادیر $a/(M+m)$ و $Ka/2$ (معادلهٔ (۶-۲) را ببینید، با رعایت این که تعریف a تغییر کرده است) بـه تـرتیب بـه جـای جـرم واحـد طـول ρ و مدول کشسانی C در معادلهٔ (۲-۱۴) این نکته تائید می‌شود.

پاسخهای حدی دیگر معادلهٔ (۲-۲۱) به $ka=\pi$ یعنی $\sin(\frac{1}{2}ka)=1$ مربوط می‌شوند. در این مورد داریم

$$\omega^2 = \frac{K(M+m)}{Mm} \pm K\left[\left(\frac{M+m}{Mm}\right)^2 - \frac{4}{Mm}\right]^{1/2}$$

$$= \frac{K(M+m) \pm K(M-m)}{mM}$$

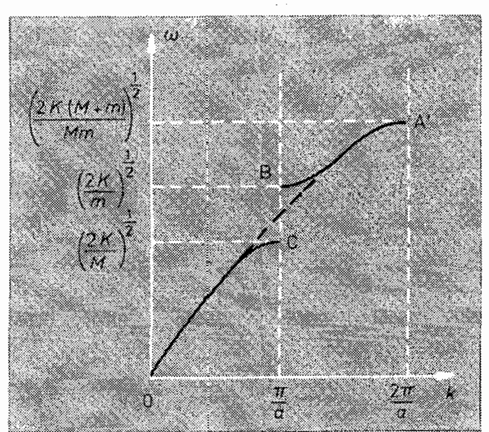
$$= 2K/m \quad \text{یا} \quad 2K/M$$

که با توجه به معادلهٔ (۲-۱۹)، دامنهٔ نسبی متناظر به ترتیب $\alpha=\infty$ یا $\alpha=0$ است. در این حد نصف طول موج برابر a، فاصلهٔ بین اتمهای از یک نوع است. در اولین پاسخ m ارتعاش می‌کند و M ساکن است (نقطهٔ B در شکل ۲-۷ اگر $M > m$) و بنابراین بسامد فقط به m وابسته است؛ در دومین پاسخ m ساکن است و M ارتعاش می‌کند (نقطهٔ C در شکل ۲-۷).

مقایسهٔ نتایج فعلی با نتایج بخش ۲-۳-۱ برای زنجیرهٔ تک اتمی آموزنده است. در شکل ۲-۸ شاخهٔ با بسامد کمتر شکل ۲-۷ را در ناحیهٔ $k < \frac{\pi}{a}$ و شاخهٔ با بسامد بیشتر این شکل را در ناحیهٔ $\frac{\pi}{a} < k < \frac{2\pi}{a}$ رسم می‌کنیم. حال اگر اجازه دهیم که $m \rightarrow M$، نقاط B و C در شکل ۲-۸ به طرف یکدیگر میل می‌کنند و همان گونه که باید شکل ۲-۴ را به دست می‌آوریم. (فراموش نکنید که مقدار a در شکل ۲-۴ نصف مقدار آن در شکل ۲-۸ است.)

بنابراین در نحوهٔ نسبت دادن مقادیر k به مدهای شبکهٔ دو اتمی از نوعی اختیار برخورداریم. سرراستترین مقایسه با شبکهٔ تک اتمی توسط شکل ۲-۸ حاصل می‌شود، که در آن به ازای هر k تنها یک ω داریم و $2N$ مد در گسترهٔ $\frac{-2\pi}{a} < k \leq \frac{2\pi}{a}$ وجود دارد. ولی متداولتر آن است کـه مانند شکل ۲-۷ کوچکترین k ی ممکن را به هر مد نسبت دهیم.

اکنون در گستره $\frac{-\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$ دو شاخه هر یک با N مد وجود دارد. شیوهٔ نگرش اخیر شیوهٔ مـتعارف است و ایـن سـودمندی را داراست کـه گسترهٔ مـقادیر k ی مساوی (ضـلع یـاختهٔ یکّه)/ 2π، و مستقل از تعداد اتمها در یاختهٔ یکّه است.



شکل ۲-۸: در اینجا شکل ۲-۷ را برای مقایسه با شکل ۲-۴ ترسیم مجدد کرده‌ایم؛ در حد $M \to m$ نقاط B و C به یکدیگر نزدیک می‌شوند و رابطهٔ پاشندگی توسط خط چین‌ها داده می‌شود. جابه‌جایی‌های اتمی در A' همانند جابه‌جایی‌های اتمی در نقطه A در شکل ۲-۷ است.

گرچه وقتی محدودیت نیروها به نیروهای نزدیک‌ترین همسایگان برداشته می‌شود رابطهٔ پاشندگی دیگر با معادلهٔ (۲-۲۱) داده نمی‌شود، اما بیشتر نتیجه‌گیری کیفی که ما در بالا در خصوص ماهیت رابطهٔ پاشندگی به دست آوردیم، همچنان معتبر باقی می‌ماند. به ویژه رابطهٔ پاشندگی دو شاخه خواهد داشت که هر دو برحسب k با دورهٔ $\frac{2\pi}{a}$ دوره‌ای‌اند. تنها یکی از شاخه‌ها در طول موج بلند دارای شکل حدی امواج صوتی است (در $k \to 0$ ثابت $\to \frac{\omega}{k}$). در نتیجه این شاخه، یعنی شاخهٔ پایین‌تر در شکل ۲-۷، **شاخهٔ آکوستیکی** نامیده می‌شود. شاخهٔ دیگر **شاخهٔ اپتیکی** نامیده می‌شود زیرا وقتی در این شاخه $k \to 0$ ارتعاشات دو نوع اتم در فاز مقابل یکدیگرند و نوسانهای حاصل برای بارها در یک بلور یونی، در بسامد نقطهٔ A در شکل ۲-۷، دارای جفتیدگی شدیدی با امواج الکترومغناطیسی است. با برون‌یابی رابطهٔ خطی ω/k در شکل ۲-۸ از حوالی $k = 0$ تا $k = \frac{2\pi}{a}$ تخمینی از این بسامد به دست می‌آید؛ این در اصل، همان روشی است که برای تخمین بسامد ارتعاشات شبکه در پایان بخش ۲-۲ به کار بردیم، و در نتیجه جوابی در ناحیهٔ فروسرخ طیف الکترومغناطیسی ارائه می‌دهد.

۲-۴ ارتعاشات شبکه در بلورهای سه بعدی

اینک به اختصار توضیح می‌دهیم که خواص ارتعاشات شبکه در بلورهای یک بعدی چگونه در بلورهای سه بعدی واقعی متجلی می‌شود. در یک راستای بخصوص در بلور سه بعدی، روابط پاشندگی برای امواج ارتعاشی شبکه مشابه روابطی است که در شکل‌های ۲-۴ و ۲-۷

نشان داده شده‌اند. بعضی روابط پاشندگی تجربی را بعداً در شکل ۱۲-۷ نشان می‌دهیم. ω در هر شاخه از رابطهٔ پاشندگی تابعی دوره‌ای از بردار موج $\mathbf{k}$ است؛ این که شبکهٔ بلور چگونه دوره‌ای بودن را معین می‌کند در فصل ۱۱ شرح داده شده است.

برای یاخته یکهٔ تک اتمی تفاوت عمدهٔ حالت سه بعدی با شکل ۲-۴ وجود سه شاخه رابطه پاشندگی است؛ وقتی $|\mathbf{k}| \to 0$ هر شاخه به یکی از سه موج صوتی ممکن میل می‌کند لذا هر سه شاخه آکوستیکی‌اند. تعداد مدهای ارتعاشی در هر شاخه، درست نظیر بلورهای یک بعدی، مساوی N یعنی تعداد یاخته‌های یکّهٔ بلور است به گونه‌ای که جمعاً $3N$ مد وجود دارد. لذا، همان طور که انتظار می‌رود، تعداد مدها برابر تعداد معادلات حرکت است (یک معادله برای هر مختصه دکارتی هر یک از N اتم).

در یک بلور سه بعدی با دو اتم در یاختهٔ یکّهٔ بسیط، سه شاخهٔ آکوستیکی و سه شاخهٔ اپتیکی موجود است. نتیجهٔ کلی برای یاختهٔ حاوی S اتم سه شاخهٔ آکوستیکی و $3(S-1)$ شاخهٔ اپتیکی است؛ تعداد مدهای ارتعاشی مربوط به هر شاخه از رابطهٔ پاشندگی همواره برابر تعداد یاخته‌های یکه است به گونه‌ای که تعداد کل مدها همیشه سه برابر تعداد اتمهای بلور است.

اکنون به اختصار روش تعیین حرکت اتمها در بلور سه بعدی را حداقل از نظر اصولی توضیح می‌دهیم. با توجه به تمرکز بیشتر جرم اتم در هستهٔ آنها حرکت هسته مورد توجه است. جرم بزرگ هسته، ما را قادر به اعمال تقریب بسیار مفیدی می‌کند، که مسئله را از هر دو نظر مفهومی و ریاضی ساده می‌کند. این تقریب، **تقریب بی‌دررو** است و به موجب آن می‌توان حرکت الکترونها را با تقریب خوبی از حرکت هسته‌ها تفکیک کرد. از آن جا که هسته‌ها از الکترونها بسیار سنگین‌ترند لذا آهسته‌تر از آنها حرکت می‌کنند و بنابراین الکترونها در هر لحظه به گونه‌ای رفتار می‌کنند که گویی هسته‌ها در مکان لحظه‌ای خود ساکن‌اند. به عبارت دیگر می‌توانیم با تقریب خوبی یک تابع موج الکترونی را به عنوان ویژه تابع مربوط به وضعیتی که در آن هسته‌ها در مکان لحظه‌ای خود ساکن‌اند بشناسیم؛ این تابع موج با حرکت هسته‌ها ضمن حفظ خاصیت ویژه تابعی، خود را به آهستگی با شرایط مرزی در حال تغییر تنظیم می‌کند. یک چنین اختلال آهستهٔ شرایط مرزی (به طور ایده‌آل بینهایت آهسته) **اختلال بی دررو** نامیده می‌شود، و به عنوان یک اصل مکانیک کوانتومی این اختلال باعث گذار بین حالتهای کوانتومی نمی‌شود[1]. تابع موج و انرژی در حین اختلال بی‌دررو تغییر می‌کنند ولی حالتهای کوانتومی تغییر نمی‌کنند.

با این تقریب می‌توان انرژی بلور را در دو مرحله محاسبه کرد. ابتدا انرژی الکترونی،

۱- برای مثال کتاب زیر را ببینید

R. Becker, Theory of Heat, Springer, Berlin, 1967, pp. 170-3

$E_e(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots \mathbf{R}_N)$، را برای هسته‌های ساکن در مکانهای لحظه‌ای $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2 \dots \mathbf{R}_N$ محاسبه می‌کنیم. سپس در حالتی که هسته‌ها مجاز به حرکت‌اند نیز، با به‌کارگیری تقریب بی‌دررو که در بالا توصیف شد سهم الکترونها در انرژی کل دستگاه را قاطعانه برابر همین $E_e(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N)$ که محاسبه کردیم می‌گیریم. لذا انرژی کل جامد به قرار زیر است

$$E_{tot} = \sum_{i=1}^{N} \frac{P_i^2}{2M_i} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N} \frac{Q_i Q_j}{4\pi\varepsilon_0 \mid \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j \mid} + E_e(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N)$$

(۲-۲۲)

که P_i ، M_i و Q_i به ترتیب اندازه حرکت، جرم و بار هستهٔ iام اند. اولین جمله در رابطهٔ (۲-۲۲) انرژی جنبشی هسته‌ها، دومین جمله انرژی پتانسیل الکتروستاتیکی هسته‌ها و آخرین جمله انرژی الکترونی است. مشاهده می‌کنیم که $E_e(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N)$ مانند یک انرژی پتانسیل برهم‌کنشی اضافی بین هسته‌ها ظاهر می‌شود.

برای محاسبهٔ ارتعاشات شبکه به صورت کاملاً کوانتومی، باید معادله شرودینگر برای حرکت هسته‌ها را با بهره‌گیری از یک هامیلتونی که در آن به جای اندازه حرکتهای P_i عملگرهای مکانیک کوانتومی هم‌ارز آنها یعنی $-i\hbar\nabla_i$ در معادلهٔ (۲-۲۲) نشانده شده است حل کنیم. در روش کلاسیکی قوانین نیوتن را برای هر یک از N یون متحرک در پتانسیل $V(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N)$ مربوط به دو جملهٔ آخر رابطهٔ (۲-۲۲) می‌نویسیم. پیشرفت در هر دو روش تنها با اعمال تقریب هماهنگ که در آن پتانسیل $V(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N)$ در یک سری تایلور برحسب جابه‌جایی هسته‌ها از مکان ترازمند آنها تا مرتبهٔ دوم بسط داده شده است، حاصل می‌شود. چون پتانسیل در مکان ترازمند کمینه است، جملات مرتبهٔ اول حذف می‌شوند. جملات درجهٔ دو برحسب جابه‌جایی به انرژی پتانسیل نوسانگرهای ساده شباهت دارند و به امواج شبکه با ویژگیهایی که قبلاً نشان دادیم منجر می‌شوند. وجود پتانسیل $V(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N)$ برای هر بلور دستاورد مهم تقریب بی‌دررو است؛ تنها در بلورهای ساده گازهای بی‌اثر یونی عبارت $V(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N)$ را می‌توان به صورت مجموع پتانسیل‌های بین اتمی زوجهای اتمی نوشت. بررسی مبسوط محاسبهٔ ارتعاشات شبکه در یک بلور سه بعدی را می‌توان در فصل‌های ۲۲ و ۲۳ کتاب اشکرافت و مرمین یافت[11].

در انجام محاسبات E_e را معمولاً انرژی حالت پایهٔ الکترونها در نظر می‌گیرند، هر چند معادلهٔ (۲-۲۲) برای حالت برانگیخته نیز برقرار است. به طور کلی وجود حالتهای برانگیخته الکترونی چندان تأثیری بر حرکت هسته‌ها ندارد.

۲-۵ فونونها

تا به حال مکانیک ارتعاشات شبکه را به شیوهٔ کاملاً کلاسیکی در نظر گرفته‌ایم. تا جایی که مدهای بهنجاری که یافته‌ایم حقیقتاً هماهنگ و مستقل باشند، گذار به مکانیک کوانتومی به آسانی و تنها با در نظر گرفتن اینکه یک مد ارتعاشی شبکه با بسامد ω مانند یک نوسانگر هماهنگ ساده رفتار خواهد کرد، صورت می‌گیرد و لذا انرژی به مقادیر زیر محدود است.

$$\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \qquad (۲-۲۳)$$

از آن جا که معادلهٔ (۲-۲۳) مجموعه‌ای از ترازهای انرژی با فاصله‌های یکسان را نمایش می‌دهد، می‌توان حالت ε_n را با افزودن n "کوانتوم برانگیختگی"، هر یک با انرژی $\hbar\omega$، به حالت پایه در نظر گرفت. احتمالاً این گونه نگرش را قبلاً در زمینهٔ تابش الکترومغناطیسی با بسامد زاویه‌ای ω مشاهده کرده‌اید؛ در آن جا می‌گوییم حالت ε_n متناظر است با وجود n **فوتون** هر یک با انرژی $\hbar\omega$. واقعیت داشتن چنین ذرات حامل انرژی، برای مثال، در پدیده فوتوالکتریک نشان داده می‌شود.

اغلب مناسبتر است که ارتعاشات شبکه را به روشی مشابه، و با معرفی مفهوم فونونهای با انرژی $\hbar\omega$ به منزلهٔ کوانتومهای برانگیختگی مد ارتعاشی شبکه با بسامد زاویه‌ای ω بررسی کنیم. مدهای بهنجار، امواج تختی هستند که در سرتاسر بلور گسترده‌اند، و فونونها نیز متناظراً ذرات جایگزیده‌ای نیستند؛ از آن جا که اندازه حرکت $\hbar\mathbf{k}$ دقیق است لذا اصل عدم قطعیت ایجاب می‌کند که مکان فونون را نتوان تعیین کرد. ولی درست همانند فوتون یا الکترون می‌توان با ترکیب مدهایی با بسامدها و طول موجهای با اختلاف اندک بسته موجی نسبتاً جایگزیده ساخت. به این ترتیب اگر امواجی با گستردگی $\mathbf{k}$ در محدودهٔ $\frac{\pi}{10a}$ را به کار بریم می‌توانیم بسته موجی با جایگزیدگی در محدودهٔ تقریبی ۱۰ یاختهٔ یکه بسازیم. چنین بسته موجی یک فونون نسبتاً جایگزیده را که با سرعت گروه $\frac{d\omega}{d\mathbf{k}}$ حرکت می‌کند نمایش می‌دهد. بنابراین می‌توانیم در محدودهٔ اصل عدم قطعیت، فونونها را به عنوان ذرات جایگزیده‌ای در نظر بگیریم. منحنی $\omega(\mathbf{k})$ برای ارتعاشات شبکه را می‌توانیم با ضرب هر دو محور در $\hbar$، به عنوان رابطه‌ای بین انرژی و اندازه حرکت فونونها تعبیر کنیم ($E = \hbar\omega$ ، $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$).

گر چه مناسب است که $\hbar\mathbf{k}$ را به عنوان اندازه حرکت فونون تعبیر کنیم (و ما به این کار ادامه خواهیم داد)، باید آگاه باشیم که این اندازه حرکت واقعی سینماتیکی نیست. برای مشاهدهٔ این نکته تنها لازم است به بخش ۲-۳ رجوع شود که در آن بخش در یک بلور یک بعدی، یک مد شبکه با عدد موج k را عیناً می‌توان با عدد موج $k + \frac{2\pi n}{a}$ نیز نمایش داد. به این ترتیب این امکان وجود ندارد که یک مقدار منحصر به فرد $\mathbf{k}$ به یک فونون نسبت داده شود. در

خواهیم یافت که کمیت $\hbar \mathbf{k}$ بسیاری از ویژگیهای اندازه حرکت را داراست؛ برای روشن کردن آن که این کمیت اندازه حرکت واقعی نیست غالباً آن را **اندازه حرکت بلوری** می‌خوانند.

فونونها همچون فوتونها بوزون‌اند و پایسته نیستند؛ فونون‌ها می‌توانند در اثر برخورد آفریده یا نابود شوند. به این ترتیب n در معادلهٔ (۲-۲۳) می‌تواند هر مقداری بگیرد و می‌تواند با زمان تغییر کند. ما بعداً با مثال‌هایی در خصوص مفید بودن مفهوم فونون روبه رو خواهیم شد. در بخش ۱۲-۴ خواهیم دید که وقتی نوترونها توسط جامد پراکنده*می‌شوند فونونها می‌توانند آفریده یا جذب شوند، که این منجر به اندازه‌گیری تجربی مستقیم $\omega(\mathbf{k})$ می‌شود و در بخشهای ۲-۸ و ۳-۳ خواهیم دید که با به کارگیری مدلی برای بلور حاوی گاز فونونی می‌توان رسانندگی گرمایی عایقها و مقاومت الکتریکی فلزات را درک کرد.

۲-۶ ظرفیت گرمایی ناشی از ارتعاشهای شبکه

در اغلب جامدها، انرژی مربوط به ارتعاشهای شبکه سهم عمده را در ظرفیت گرمایی دارد؛ در عایقهای غیر مغناطیسی تنها سهم در ظرفیت مربوط به همین انرژی است. در فلزات، سهمهای دیگر انرژی ناشی از الکترونهای رسانش و در مواد مغناطیسی ناشی از نظم مغناطیسی است.

در مثالهای بلورهای یک بعدی دیده‌ایم که جفتیدگی ارتعاشهای اتمی، به نواری از بسامدهای مد بهنجار، از صفر تا یک مقدار بیشینه، منجر می‌شود. از اینرو محاسبه انرژی شبکه و ظرفیت گرمایی جامد به دو قسمت تقسیم می‌شود: محاسبهٔ سهم یک تک مد، مجموعیابی روی توزیع بسامد مدها.

۲-۶-۱ انرژی و ظرفیت گرمایی نوسانگر هماهنگ

انرژی متوسط $\overline{\varepsilon}$ یک نوسانگر هماهنگ و از آنجا انرژی متوسط یک مد شبکه با بسامد زاویه‌ای ω و در دمای T به قرار زیر است:

$$\overline{\varepsilon} = \sum_{n} p_n \varepsilon_n$$

که در آن ε_n یک تراز انرژی این نوسانگر است که با معادله (۲-۲۳) داده می‌شود و p_n احتمال آن است که این نوسانگر در این تراز باشد، که با عامل بولتزمن $exp\,(-\varepsilon_n / k_B\, T)$ بیان می‌شود. بنابراین

$$\overline{\varepsilon} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} (n+\frac{1}{2})\hbar\omega\, exp\,[-(n+\frac{1}{2})\hbar\omega / k_B T]}{\sum_{n=0}^{\infty} exp\,[-(n+\frac{1}{2})\hbar\omega / k_B T]}$$

روش ظریفی برای محاسبهٔ این عبارت آن است که $\bar{\varepsilon}$ را به صورت زیر بنویسیم:

$$\bar{\varepsilon}=k_B\ T^{۲}\frac{۱}{Z}\ \frac{\partial Z}{\partial T}=k_B\ T^{۲}\ \frac{\partial(lnZ)}{\partial T} \qquad (۲\text{-}۲۴)$$

که در آن

$$Z=\sum_{n=o}^{\infty} exp[-(n+\frac{۱}{۲})\hbar\omega/k_B\ T]$$
$$=e^{-\hbar\omega/۲k_BT}(۱-e^{-\hbar\omega/k_B T}+e^{-۲\hbar\omega/k_B T}+\dots)$$
$$=e^{-\hbar\omega/۲k_B T}(۱-e^{-\hbar\omega/k_B T})^{-۱} \qquad (۲\text{-}۲۵)$$

Z در واقع تابع پارش این نوسانگر است (مندل [۲]، فصل ۶) و با توجه به اینکه مجموعیابی به صورت یک سری هندسی است، که در آن نسبت جملههای پیاپی برابر $exp(-\hbar\omega/k_B\ T)$ است، محاسبه شده است. بنابراین، با استفاده از معادلهٔ (۲-۲۴) میتوان نوشت

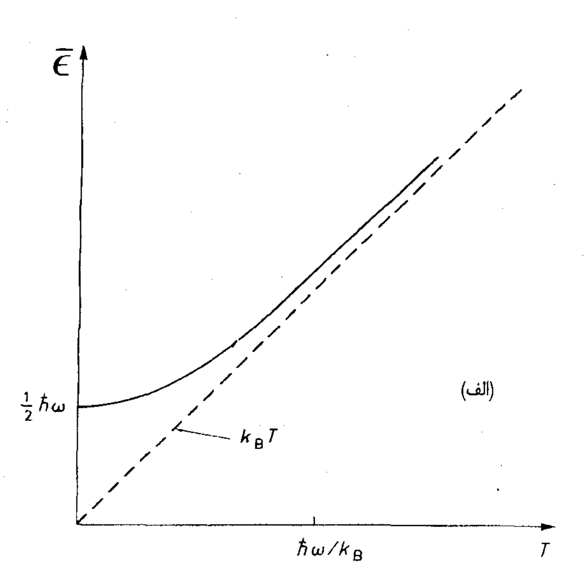
$$\bar{\varepsilon}=\frac{۱}{۲}\ \hbar\omega\ +\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T}-۱} \qquad (۲\text{-}۲۶)$$

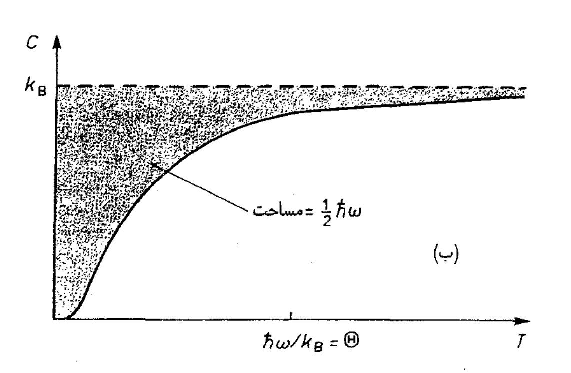
این انرژی میانگین به سادگی برحسب فونون تعبیر میشود. برای بوزونهایی با انرژی $\hbar\omega$، که تعداد آنها پایسته نیست، تعداد میانگین بوزونهای موجود در ترازمندی گرمایی در دمای T، همانند مورد فوتونها در تابش جسم سیاه (مندل [۲]، فصل ۱۰)، با تابع توزیع بوز - اینشتین بیان میشود:

$$n(\omega)=\frac{۱}{e^{\hbar\omega/k_B T}-۱} \qquad (۲\text{-}۲۷)$$

با ضرب کردن معادلهٔ (۲-۲۷) در $\hbar\omega$ جملهٔ دوم در معادلهٔ (۲-۲۶) را به عنوان سهم فونونها در انرژی به دست میآوریم. جملهٔ اول در معادلهٔ (۲-۲۶)، یعنی $\frac{۱}{۲}\ \hbar\omega$، انرژی نقطهٔ صفر است و به دلیل اصل عدم قطعیت، در دمای صفر هم باقی میماند. شکل ۲-۹(الف) نشان میدهد که انرژی میانگین، در حد دمای پایین، $k_B\ T\ll\hbar\omega$، به انرژی نقطهٔ صفر میگراید. در دماهای بالا، $k_B\ T\gg\hbar\omega$، جملهٔ نهایی را میتوان بسط داد

$$\bar{\varepsilon}=\frac{۱}{۲}\ \hbar\omega+\ \hbar\omega\left[\frac{\hbar\omega}{k_B\ T}+\frac{۱}{۲}\ \left(\frac{\hbar\omega}{k_B\ T}\right)^{۲}+\dots\right]^{-۱}$$
$$=\frac{۱}{۲}\ \hbar\omega+k_B\ T\left[\ ۱-\frac{۱}{۲}\ \frac{\hbar\omega}{k_B\ T}\ +\dots\right]$$
$$=k_B\ T\left[\ ۱+O\left(\frac{\hbar\omega}{k_B\ T}\right)^{۲}\right]\approx k_B\ T \qquad (۲\text{-}۲۸)$$





شکل ۲-۹ (الف) : انرژی میانگین و (ب) ظرفیت گرمایی یک نوسانگر هماهنگ ساده به صورت توابعی از دما.

و به این ترتیب، در این حد، مقدار همپاری کلاسیکی به دست می‌آید؛ توجه کنید که انرژی گرمایی نوسانگر هماهنگ یک بعدی کلاسیکی $k_B T$ است و نه $\frac{1}{2} k_B T$، زیرا انرژی پتانسیل نیز مانند انرژی جنبشی به صورت یک سهم مجذوری در انرژی کل ظاهر می‌شود. ظرفیت گرمایی C با مشتق‌گیری از معادلهٔ (۲-۲۶) نسبت به دما به دست می‌آید، یعنی

$$C = \frac{d\bar{\varepsilon}}{dT} = k_B \left(\frac{\Theta}{T} \right)^2 \frac{e^{\Theta/T}}{(e^{\Theta/T} - 1)^2} \qquad (۲۹-۲)$$

که در آن $\Theta = \hbar\omega / k_B$ است. ظرفیت گرمایی C به صورت تابعی از T در شکل ۲-۹ (ب) رسم

شده است. C در دماهای پایین به طور نمایی صفر می‌شود و در دماهای بالا به مقدار کلاسیکی k_B میل می‌کند.

خصلت‌های عام شکل (۲-۹) در تمام دستگاههای کوانتومی متداول هستند؛ انرژی در دماهای پایین به انرژی نقطهٔ صفر و در دماهای بالا به مقدار همپاری کلاسیکی می‌گراید؛ ظرفیت گرمایی در دمای صفر مطلق به سمت صفر میل می‌کند و با افزایش دما به مقدار کلاسیکی صعود می‌کند به نحوی که "مساحت سطح از دست رفتهٔ" زیر منحنی ظرفیت گرمایی کلاسیکی [قسمت سایه زده شده در شکل ۲-۹(ب)] برابر با انرژی نقطهٔ صفر می‌شود.

اولین نظریهٔ کوانتومی ظرفیت گرمایی جامدات را اینشتین ارائه کرد. وی این فرض ساده ساز را مطرح کرد که تمامی $۳N$ مد ارتعاشی یک جامد سه بعدی متشکل از N اتم، بسامد یکسان دارند، به نحوی که ظرفیت گرمایی تمام جامد برابر با $۳N$ ضربدر معادلهٔ (۲-۲۹) است. حتی این مدل بسیار خام نیز، در دماهای بالا حد درست ظرفیت گرمایی، یعنی $۳Nk_B$ ($= ۳R$ به ازای هر مول از اتمها، که برای اولین بار به طور نیم تجربی توسط دولن و پتی یافت شد) را به دست داد؛ این نتیجه صرفاً به نظریهٔ کلاسیکی همپاری انرژی بستگی دارد. علاوه براین، مدل اینشتین، حد گرمای ویژهٔ صفر را در صفر مطلق به درستی به دست داد، ولی وابستگی گرمای ویژه به دما در مجاورت $T = ۰$ با تجربه سازگار نبود. به عنوان نقطهٔ آغازین بحث، این تناقض را با به حساب آوردن توزیع واقعی بسامدهای ارتعاشی در یک جامد و با استفاده از الگوی یک بعدی در بخش ۲-۳، برطرف خواهیم ساخت.

۲-۶-۲ چگالی حالتها

در بخش ۲-۳، دیدیم که به کارگیری شرایط مرزی دوره‌ای در بلور یک بعدی متشکل از N یاختهٔ یکه به ضلع a، اعداد موج مجاز را به صورت زیر به دست می‌دهد:

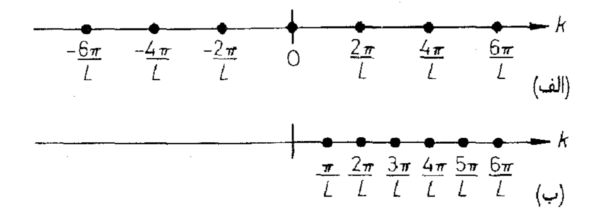
$$k = \frac{۲\pi p}{Na} = \frac{۲\pi p}{L}$$

که در آن p عددی است درست و $L = Na$ طول چنین بلور است. بنابراین مقادیر مجاز k دارای توزیع یکنواختی، با چگالی $\rho_R(k)$، در فضای k است [شکل ۲-۱۰ (الف)] به نحوی که تعداد مقادیر در گسترهٔ $k \to k + dk$ به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\rho_R(k)\,dk = \frac{L}{۲\pi}\,dk \qquad (۳۰\text{-}۲)$$

این مقادیر مجاز k، متناظر با امواج متحرک‌اند، در نتیجه هم مقادیر مثبت و هم مقادیر منفی از اهمیت برخوردارند.

بعضی اوقات مناسبتر است زنجیری را با دو انتهای ثابت در نظر بگیریم، که در آن صورت



شکل ۲-۱۰ : مقادیر مجاز k برای (الف) امواج متحرک و (ب) امواج ساکن روی زنجیری یک بعدی به طول L توجه کنید که یک موج متحرک با $k=\text{۰}$ متناظر است با جابه‌جایی صلب یک بلور به صورت یک جا؛ یک موج ساکن با $k=\text{۰}$ وجود ندارد.

مدهای بهنجار امواج ساکن هستند و تعداد درستی از نیم طول موجها در زنجیر داریم، به طوری که $L=n\lambda/\text{۲}$ و $k=\text{۲}\pi/\lambda=n\pi/L$. از این رو حالتهای موج ساکن به طور یکنواخت با چگالی $\rho_s(k)$، در فضای k است [شکل ۲-۱۰ (ب)] و تعداد حالتها در گسترهٔ $k\to k+dk$ عبارت است از

$$\rho_s(k)\,dk=\frac{L}{\text{۲}\pi}\,dk \tag{۲-۳۱}$$

بنابراین چگالی حالتهای موج ساکن دو برابر چگالی حالتهای موج متحرک است. ولی از آنجایی که تنها مقادیر مثبت k، برای امواج ساکن به کار می‌رود، لذا تعداد کل حالتها درون گسترهٔ dk از بزرگی k برای امواج متحرک و ساکن یکسان است. رابطهٔ پاشندگی امواج متحرک و امواج ساکن یکی است، و برای زنجیری از N اتم، دقیقاً N حالت متمایز موج ساکن با مقادیر k واقع در گسترهٔ ۰ تا π/a وجود دارد.

برای محاسبهٔ انرژی یا ظرفیت گرمایی به وسیله مجموع یابی روی مدهای بهنجار، به **چگالی حالتها به ازای واحد گسترهٔ بسامد**، $g(\omega)$، نیاز داریم. این چگالی به نحوی تعریف می‌شود که تعداد مدهای با بسامدهای $\omega\to\omega+d\omega$ برابر $g(\omega)\,d\omega$ باشد. می‌توانیم $g(\omega)$ را برحسب $\rho_s(k)$ بنویسیم. اگر dn مد بابسامد ω تا $\omega+d\omega$ متناظر با گسترهٔ عدد موج k تا $k+dk$ وجود داشته باشد، در آن صورت

$$dn=\rho_s(k)\,dk=g(\omega)\,d\omega$$

و در نتیجه

$$g(\omega)=\rho_s(k)\frac{dk}{d\omega} \tag{۲-۳۲}$$

بنابراین، با استفاده از معادلهٔ (۲-۹) برای $\omega(k)$ مربوط به زنجیری از اتمهای یکسان، داریم

$$\frac{d\omega}{dk} = a\left(\frac{K}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \cos\left(\frac{1}{2}ka\right)$$

و از آنجا

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi a}\left(\frac{M}{K}\right)^{\frac{1}{2}} \sec\left(\frac{1}{2}ka\right)$$

$$= \frac{N}{\pi}\left(\frac{M}{K}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{2(K/M)^{\frac{1}{2}}}{(4K/M - \omega^2)^{\frac{1}{2}}}$$

$$= \frac{2N}{\pi}\left(\frac{4K}{M} - \omega^2\right)^{-\frac{1}{2}}$$

(۲-۳۳)

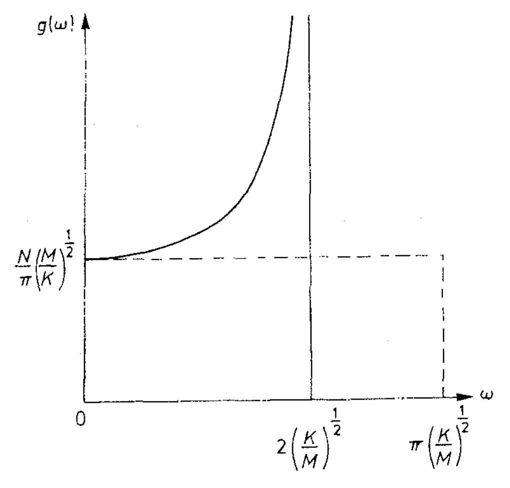
این چگالی در شکل ۲-۱۱ رسم شده است؛ توجه داریم که با نزدیک شدن بسامد از سمت بسامدهای کمتر به بسامد قطع $2(K/M)^{1/2}$ ، چگالی حالتها به بی‌نهایت میل می‌کند، زیرا سرعت گروه $d\omega/dk$ در بسامد قطع به صفر می‌گراید. اگر از پاشندگی صوت در طول موجهای قابل مقایسه با فاصلهٔ بین اتمی چشم پوشی کرده بودیم، به چگالی حالتهای ثابتی می‌رسیدیم که با خط چین در شکل ۲-۱۱ نشان داده شده است. در این مورد تعداد کل حالتها، تا بسامدی برابر با $\omega = \pi(K/M)^{1/2}$ ، به مقدار N نمی‌رسد. خواننده لازم است بیازماید که برای امواج متحرک، همان‌مقدار $g(\omega)$ به دست می‌آید که از معادلهٔ (۲-۳۳) حاصل شد.

انرژی ارتعاشات شبکه با انتگرال‌گیری از انرژی یک تک نوسانگر، معادلهٔ (۲-۲۶)، روی توزیع بسامدهای ارتعاش، به دست می‌آید. بنابراین

$$E = \int_0^\infty \left(\frac{1}{2}\hbar\omega + \left[\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}\right]\right) g(\omega)\, d\omega \qquad \text{(۲-۳۴)}$$

بیش از این به مسئلهٔ یک بعدی نخواهیم پرداخت. زیرا نمی‌توان آن را، با تجربه مقایسه کرد. در عوض تلاش خواهیم کرد محاسبهٔ $g(\omega)$ را به سه بعد تعمیم دهیم.

قدم اول برای این کار، محاسبهٔ تعداد مدهای شبکه در گسترهٔ خاصی از بردار موج $\mathbf{k}$ است. در این کتاب در خواهیم یافت که نیاز به شمارش حالتهای $\mathbf{k}$ ، یک مسئلهٔ مشترک در انواع بسیاری از حرکتهای موجی در بلورهاست. بنابراین در اینجا آن را به تفصیل بحث خواهیم کرد و از این



شکل ۲-۱۱: چگالی حالتهای زنجیری از اتمهای یکسان. منحنی پر چگالی واقعی حالتها را به دست می‌دهد؛ خط چین مبین چگالی حالتهای حاصل از نادیده گرفتن پاشندگی صوتی است.

پس وقتی با انواع دیگری از امواج مواجه می‌شویم، به نتایج این بخش مراجعه خواهیم کرد. هر چند، انتخاب شرایط مرزی، همانند حالت یک بعدی، مشخص می‌کنند که آیا با امواج متحرک سروکار داریم یا امواج ساکن، ولی تعداد حالتها در گستره‌ای خاص از بزرگی **k** همواره مستقل از انتخاب شرایط مرزی برای بلورهای ماکروسکوپی است.

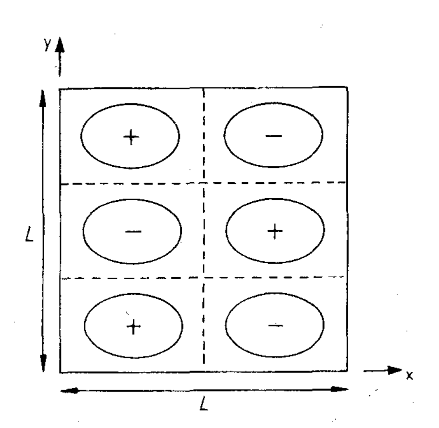
مطلب را با بررسی بلوری دو بعدی به ضلع L، مطابق شکل ۲-۱۲ (الف) آغاز می‌کنیم. اگر فرض کنیم که شرط مرزی در لبه‌های بلور آن باشد که در آنجا دامنهٔ ارتعاشی صفر شود، در آن صورت امواج ارتعاش شبکه، امواج ساکنی به شکل زیر خواهند بود:

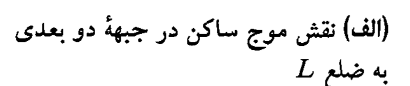
$$u = u_{\circ} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \qquad \textbf{(۲-۳۵)}$$

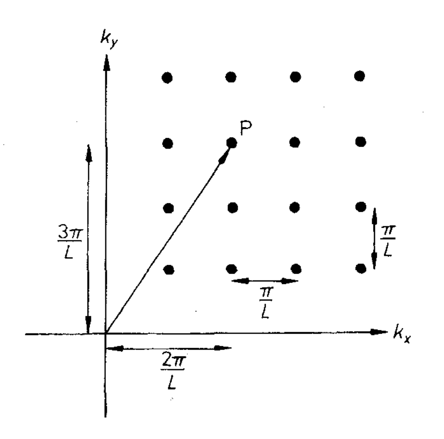
این معادله شرط مرزی صفر شدن موج در لبه‌های $x = \circ$ و $y = \circ$ را همواره ارضاء می‌کند و شرط مرزی صفر شدن موج در لبه‌های $x = L$ و $y = L$ را نیز به شرطی ارضاء می‌کند که داشته باشیم

$$k_x = \pi p / L \quad \text{و} \quad k_y = \pi q / L \qquad \textbf{(۲-۳۶)}$$

که در آن p و q اعداد درست **مثبت**اند (تغییر علامت اعداد p و q جواب متفاوتی به دست نمی‌دهد). مقادیر مجاز مؤلفه‌های بردار موج می‌توانند به صورت شبکه در فضایی، با محورهای k_x و k_y نمایش داده شوند [شکل ۲-۱۲(ب)] ؛ فضایی از این نوع به عنوان فضای - **k** موسوم است و این مفهوم در فیزیک حالت جامد کاربرد زیادی دارد. دیده می‌شود که مقادیر مجاز **k**




(الف) نقش موج ساکن در جبهۀ دو بعدی به ضلع L



(ب) نمودار مدهای مجاز در فضای $\mathbf{k}$؛ مدی که در (الف) نشان داده شده است با نقطۀ P نمایش داده می‌شود.

شکل ۲-۱۲

بر شبکه‌ای مربعی به ضلع π/L در ربع **مثبت** فضای - $\mathbf{k}$ قرار دارند و از این رو در سرتاسر این ناحیه با چگالی $(L/\pi)^2$ به ازای واحد سطح به طور یکنواخت توزیع شده‌اند.

این نتیجه را به سادگی می‌توان به سه بعد گسترش داد. تعمیم معادلۀ (۲-۳۶) در مورد بلوری مکعبی به ضلع L، نشان می‌دهد که حالت مجاز **موج ساکن** با یک شبکۀ مکعبی ساده به ضلع π/L، در یک هشتم از فضای سه بعدی - $\mathbf{k}$، که در آن k_x، k_y و k_z همگی مثبت اند، نمایش داده می‌شود. بنابراین، تعداد حالتهای **موج ساکن** در عنصر حجم $d^3\mathbf{k}$، در این یک هشتم از فضای - $\mathbf{k}$ عبارت است از

$$\rho_s(\mathbf{k})\,d^3\mathbf{k} = \left(\frac{L}{\pi}\right) d^3\mathbf{k} = \frac{\mathbf{V}}{\pi^3}\, d^3\mathbf{k} \qquad (۳۷\text{-}۲)$$

که در آن $V=L^3$ حجم بلور $\rho_s(\mathbf{k})=V/\pi^3$ چگالی حالتهای امواج ساکن در یک بلور سه

بعدی است.

وقتی بخواهیم خاصیتی از امواج را مجموع یابی کنیم که فقط به بزرگی **k** بستگی داشته باشد و نه به جهت **k** (البته این ویژگی در بسامدهای مدهای ارتعاش شبکه‌ای به طور کامل برقرار نیست ولی اغلب یک تقریب به‌کار برده می‌شوند)، مناسب است پوسته‌ای کروی بین k و $k + dk$ به منزلهٔ عنصر حجم در فضای - **k**، مطابق شکل ۲-۱۳ انتخاب کنیم. بنابراین

$$d^{3}\mathbf{k}=\frac{1}{8}\times 4\pi k^{2}dk$$

که در آن عامل $\frac{1}{8}$ به این دلیل ظاهر می‌شود، که مقادیر **k** ی موج ساکن به $\frac{1}{8}$ فضای- **k** محدود می‌شود، که در آن k_x، k_y و k_z همگی مثبت اند، معادلهٔ (۲-۳۷) چنین می‌شود

$$\rho_S(\mathbf{k})d^{3}\mathbf{k}=\frac{Vk^{2}}{2\pi^{2}}\,dk=g(k)dk$$

که در آن

$$g(k)=\frac{Vk^{2}}{2\pi^{2}} \qquad (۲-۳۸)$$

تابع چگالی جدید حالتها است و به عنوان تعداد حالتها به ازای واحد **بزرگی** k تعریف می‌شود (در حالت یک بعدی $g(k)$ و $\rho_S(k)$ یکسانند، زیرا عنصر حجم در فضای - **k** ی یک بعدی همان dk است).

معادلهٔ (۲-۳۸) را برای امواج متحرک نیز می‌توان به دست آورد. امواج متحرک در یک جعبهٔ مکعبی به ضلع L، با استفاده از شرایط مرزی دوره‌ای زیر به دست می‌آیند[1]

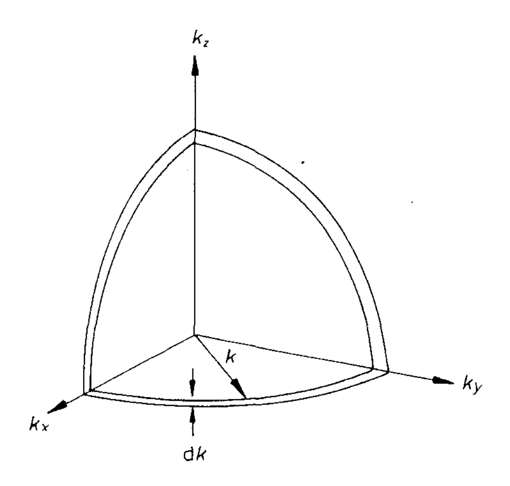
$$u(x+L,y,z)=u(x,y+L,z)=u(x,y,z+L)=u(x,y,z) \qquad (۲-۳۹)$$

با گسترش استدلالی که منجر به معادله (۲-۱۱) شد، مؤلفه‌های بردار موج مجاز برای امواج متحرک به صورت زیر به دست می‌آید:

$$k_x=2\pi p/L \qquad k_y=2\pi q/L \qquad k_z=2\pi r/L \qquad (۲-۴۰)$$

که در آن p، q و r اعداد درست **مثبت یا منفی**اند. مقادیر مجاز **k** روی یک شبکهٔ مکعبی ساده به ضلع $2\pi/L$ در فضای - **k** قرار دارند. بنابراین چگالی نقاط فقط $\frac{1}{8}$ چگالی نقاط مربوط به

۱- توجه کنید که شرایط مرزی دوره‌ای، در فضای سه بعدی، صرفاً یک تخیل مناسب است، زیرا یک جسم سه بعدی را نمی‌توان به نحوی تغییر شکل داد که به طور همزمان در تمام جهت‌ها باز به خود متصل شود. با وجود این، این تخیل مفید است، چرا که امکان تلقی کردن امواج متحرک به صورت مدهای بهنجار را فراهم می‌سازد.



شکل ۲-۱۳: پوستهٔ کروی در فضای- k که نمو dk در بزرگی k را تعریف می‌کند. تنها قسمت واقع در $\frac{1}{8}$ از فضای - k ی پوسته، که در آن k_x، k_y و k_z همگی مثبت‌اند، در این شکل نشان داده شده است. این در خور امواج ساکن است ولی در مورد امواج متحرک به پوستهٔ کامل کروی نیاز است.

شرایط مرزی موج ساکن است به نحوی که تعداد موجهای متحرک مجاز **k** در حجم $d^3\mathbf{k}$ از فضای - **k** عبارت است از

$$\rho_R(\mathbf{k})\,d^3\mathbf{k}=\frac{\mathbf{V}}{8\pi^3}\,d^3\mathbf{k} \qquad (۲\text{-}۴۱)$$

که در آن $\rho_R(k)$ اکنون چگالی حالتهای امواج متحرک است. با توجه به اینکه نقاط موج متحرک **تمامی** فضای - **k** را اشغال می‌کنند، تعداد کل نقاط درون پوسته کروی بین k و $k+dk$ برابر $4\pi k^2 dk\rho_R(k)$ می‌شود، و معادلهٔ (۲-۳۸) مجدداً به دست می‌آید. معادلات (۲-۳۷)، (۲-۳۸) و (۲-۴۱) نتایج عامی هستند که در تمامی حرکتهای موجی در بلور کاربرد دارند. هر چند چگالیهای حالتها را فقط برای بلوری به شکل مکعب محاسبه کرده‌ایم، ولی نباید نگران باشیم که خواصی که از آنها استخراج می‌شوند به شکل بستگی داشته باشند؛ آزمایش نشان می‌دهد که خواص مربوط به نمونه‌های با ابعادی به مراتب بزرگتر از ابعاد اتمی، وقتی به شیوه‌ای مناسب بیان شوند (مثل ظرفیت گرمایی به **ازای واحد جرم**)، مستقل از شکل و اندازه بلور هستند.

حال به مسئلهٔ ارتعاش شبکه باز می‌گردیم. اگر ω تابعی فقط از بزرگی k و $d\omega$ گسترهٔ ω ی متناظر با گسترهٔ dk در فضای k باشد، در آن صورت با توجه به معادلهٔ (۲-۳۸) به نتیجهٔ

$$g(\omega)=g(k)\frac{dk}{d\omega}=\frac{Vk^2}{2\pi^2}\ \frac{dk}{d\omega} \qquad (۲\text{-}۴۲)$$

می‌رسیم، که مشابه معادلهٔ (۲-۳۲) است. چگالی حالتها $g(\omega)$ را باید با استفاده از معادلهٔ (۲-۴۲)، برای هر شاخه از رابطهٔ پاشندگی محاسبه کرد و از آنجا چگالی کل حالتها را با مجموع‌یابی روی تمام شاخه‌ها به دست آورد. در این صورت، انرژی ارتعاشات شبکه را می‌توان به کمک معادلهٔ (۲-۳۴) تعیین کرد. این کاری است که بهتر است با کامپیوتر انجام شود.

به محاسبهٔ انرژی در حدهای دماهای بالا و پایین و ارائهٔ روش تقریبی برای درونیابی این حدها که برای شمار زیادی از مقاصد کفایت می‌کند، بسنده خواهیم کرد.

۲-۶-۳ حدهای دماهای بالا و پایین

همان گونه که در بخش ۲-۶-۱ قبلاً بحث کرده‌ایم، هر یک از $3N$ مد شبکهٔ بلور حاوی N اتم، در دماهای بالا، سهمی برابر با $k_B T$ در انرژی دارد، که منجر به ظرفیت گرمایی برابر

$$C = 3Nk_B \qquad (۲-۴۳)$$

می‌شود. این نتیجه تنها وقتی درست است که T به مراتب بزرگتر از دمای مشخصهٔ $\Theta = \hbar\omega/k_B$ [که بعد از معادلهٔ (۲-۲۹) تعریف شد] برای **تمام** مدهای شبکه باشد.

در دماهای پایین فقط مدهای با بسامد پایین شبکه، از حالت پایهٔ خود برانگیخته می‌شوند. اینها مدهای آکوستیکی با طول موج بلند (امواج صوتی)اند که برای آنها رابطهٔ پاشندگی به شکل $\omega = \nu_s k$ است، که در آن ν_s سرعت صوت است. چگالی حالتهای متناظر با این رابطهٔ پاشندگی به صورت زیر به دست می‌آید:

$$g(\omega) = \frac{Vk^2}{2\pi^2}\ \frac{dk}{d\omega} = \frac{V\omega^2}{2\pi^2\nu_s^3} \qquad (۲-۴۴)$$

به طوری که در حالت کلی، ν_s به جهت انتشار بستگی دارد و در نتیجه باید عامل $1/\nu_s^3$ را به عنوان متوسطی روی تمامی جهت‌ها تلقی کنیم. در واقع رابطهٔ پاشندگی سه شاخه آکوستیکی دارد، یکی طولی و دو تا عرضی، به نحوی که

$$g(\omega) = \frac{V\omega^2}{2\pi^2}\left(\frac{1}{\nu_L^3} + \frac{2}{\nu_T^3}\right) \qquad (۲-۴۵)$$

که در آن ν_L و ν_T سرعتهای صوت مربوط به مدهای طولی و عرضی‌اند و کمیت داخل پرانتز را باز هم، باید به منزلهٔ متوسطی روی تمام جهات قلمداد کرد[1].

با درج کردن چگالی حالتها از معادلهٔ (۲-۴۵) در معادلهٔ (۲-۳۴) برای انرژی ارتعاشات شبکه عبارت زیر را به دست می‌آوریم

$$E = E_z + \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{1}{\nu_L^3} + \frac{2}{\nu_T^3}\right)\int_0^\infty \left(\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega k_B T} - 1}\right)\omega^2 d\omega \qquad (۲-۴۶)$$

که در آن E_z انرژی نقطهٔ صفر است. این عبارت برای انرژی E در دماهای به قدر کافی پایین معتبر

۱- هر چند در حالت کلی، ارتعاشات دقیقاً عرضی یا طولی نیستند، ولی قطبش وابسته به هر مد را می‌توانیم با در نظر گرفتن قطبشی که آن مد در یک امتداد و انتشار با تقارن زیاد به دست می‌آورد، مشخص کنیم.

است. در این دماها، تابع توزیع بوز - اینشتین تضمین می‌کند که فقط مدهای آکوستیکی با طول موج بلند سهم محسوسی در انرژی دارند. با تغییر متغیر در انتگرال معادلهٔ (۲-۴۶) به صورت $x = \hbar\omega / k_B T$ داریم

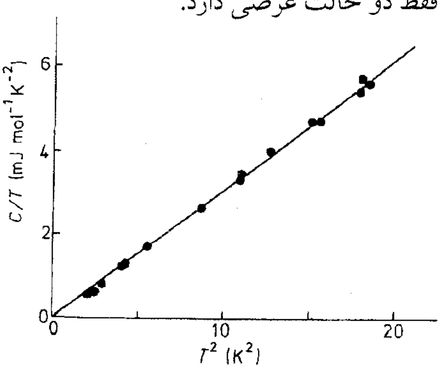
$$E = E_z + \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{1}{\nu_L^3} + \frac{2}{\nu_T^3} \right) \frac{(k_B T)^4}{\hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \tag{۲-۴۷}$$

این انتگرال، در واقع همان عدد $\pi^4 / 15$ است و با مشتق‌گیری از E نسبت به دما ظرفیت گرمایی C به دست می‌آید:

$$C = \frac{2V\pi^2 k_B}{15} \left(\frac{1}{\nu_L^3} + \frac{2}{\nu_T^3} \right) \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \tag{۲-۴۸}$$

در نتیجه، ظرفیت گرمایی شبکه‌ای جامد، در دماهای پایین، به صورت T^3 تغییر می‌کند؛ به این نتیجه اغلب عنوان قانون T^3 دبی داده می‌شود. شکل (۲-۱۴) سازگاری عالی این پیشگویی با تجربه را، برای یک عایق غیر مغناطیسی، نمایش می‌دهد؛ بعداً خواهیم دید که در ظرفیت گرمایی در دمای پایین سایر مواد، سهم‌های دیگری نیز وجود دارد. ظرفیت گرمایی جامد، کندتر از رفتار نمایی ظرفیت گرمایی تک نوسانگر هماهنگ صفر می‌شود. زیرا بیناب ارتعاشی تا بسامد در صفر گسترش دارد.

جالب توجه است که انرژی تابش جسم سیاه، در تمام دماها، به صورت T^4 تغییر می‌کند (مندل [۲]، فصل ۱۰) . این بدان علت است که خلاء دارای ساختار اتمی نیست و رابطهٔ پاشندگی $\omega = ck$ تا بسامد بینهایت به کاربرده می‌شود. تفاوت دیگر بین فوتون و فونون در آن است که فوتون حالت قطبش طولی ندارد و فقط دو حالت عرضی دارد.



شکل ۲-۱۴: ظرفیت گرمایی دمای پایین KCl که به صورتی رسم شده است که قانون T^3 را در دمای پایین به نمایش بگذارد[1]. این امر که منحنی C/T برحسب T^2 از مبداء می‌گذرد حکایت از غیاب جملهٔ T، در انرژی، دارد.

۱- این منحنی با مجوز از مرجع زیر اقتباس شده است

P.H. Keesom. N. Pearlman, Phys. Rev. 91, 1354 (1953)

۲-۶-۴ طرح درونیابی دبی

محاسبهٔ $g(\omega)$ با استفاده از نیروهای بین اتمی، برای بلور سه بعدی محاسبهٔ سنگینی است. دبی با چشمپوشی از پاشندگی امواج آکوستیکی، یعنی با فرض برقراری رابطهٔ $\omega = \nu_s k$، برای هر عدد موج، تقریب مناسبی را برای محاسبهٔ ظرفیت گرمایی به دست آورد. در بلور یک بعدی، این کار هم ارز آن است که برای $g(\omega)$، به جای منحنی توپر در شکل (۲-۱۱) منحنی خط چین را برگزینیم. در بلور سه بعدی، روش درونیابی دبی مشتمل است بر این فرض که چگالی حالتهای معادلهٔ (۲-۴۵) در تمامی بسامدها تا بسامد قطع ω_D معتبر است. **این بسامد قطع**، که بالای آن هیچ مد ارتعاشی‌ای وجود ندارد، به **بسامد دبی** موسوم است. بسامد قطع به گونه‌ای انتخاب می‌شود که تعداد کل مدهای شبکه را به درستی به دست دهد. از آنجا که، در یک بلور N اتمی، تعداد $3N$ مد ارتعاشی شبکه وجود دارد، ω_D را به نحوی برمی‌گزینیم که داشته باشیم

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega)\, d\omega = 3N \qquad (۲-۴۹)$$

از این رو، با استفاده از معادلهٔ (۲-۴۵) می‌توان نوشت

$$\frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{1}{\nu_L^3} + \frac{2}{\nu_T^3}\right)\int_0^{\omega_D} \omega^2 d\omega = 3N$$

یا

$$\frac{V}{6\pi^2}\left(\frac{1}{\nu_L^3} + \frac{2}{\nu_L^3}\right)\omega_D^3 = 3N \qquad (۲-۵۰)$$

با جانشین کردن چگالی حالتها از معادلهٔ (۲-۴۵) و استفاده از معادلهٔ (۲-۵۰)، انرژی ارتعاش شبکه [معادلهٔ (۲-۳۴)] چنین می‌شود

$$E = \frac{9N}{\omega_D^3}\int_0^{\omega_D}\left(\frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}\right)\omega^2 d\omega$$

$$= \frac{9}{8} N\hbar\omega_D + \frac{9N}{\omega_D^3}\int_0^{\omega_D}\frac{\hbar\omega^3 d\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \qquad (۲-۵۱)$$

اولین عبارت، برآوردی است که طرح درونیابی دبی برای انرژی نقطهٔ صفر به دست می‌دهد. ظرفیت گرمایی، با مشتق‌گیری از معادلهٔ (۲-۵۱) نسبت به دما، به دست می‌آید. بنابراین

$$C = 9Nk_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3\int_0^{\Theta_D/T}\frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2} \qquad (۲-۵۲)$$

که در آن، مانند بخش قبل، متغیر $x = \hbar\omega / k_B T$ را، معرفی و دمای دبی را به صورت زیر تعریف کرده‌ایم :

$$\Theta_D = \hbar\omega_D / k_B \tag{۵۳-۲}$$

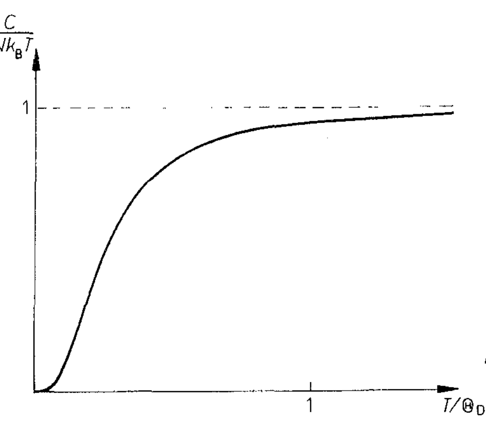
x در دماهای بالا، $T >> \Theta_D$ ، همواره کوچک است و انتگرالده، با بسط نمایی به x^2 تبدیل و ظرفیت گرمایی برابر $3Nk_B$ می‌شود که در محاسبات بخش قبل [معادلهٔ (۲-۴۳)] نیز به دست آمد. در دماهای پایین، $T << \Theta_D$ ، کران بالایی انتگرال الزاماً نامتناهی است؛ در این صورت، انتگرال درست برابر عدد $(4\pi^4/15)$ می‌شود و قانون T^3 دبی به شکل زیر به دست می‌آید:

$$C = \frac{12Nk_B\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \tag{۵۴-۲}$$

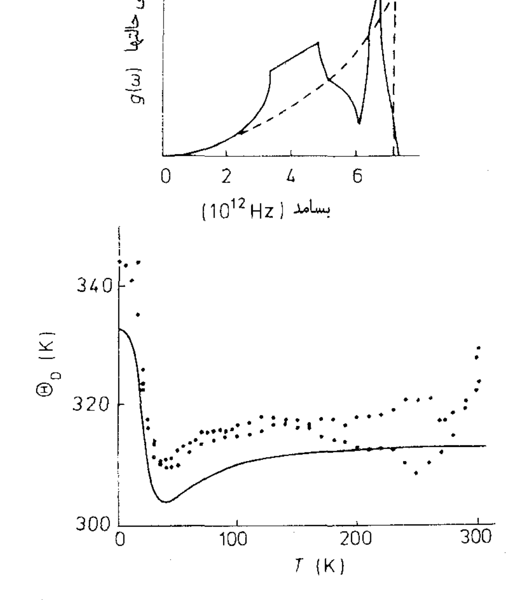
که اگر از معادلات (۲-۵۳) و (۲-۵۰) استفاده کنیم، این معادله به صورت معادلهٔ (۲-۴۸) در می‌آید.

شکل ۲-۱۵، ظرفیت گرمایی را بین این دو حد، براساس پیشگویی فرمول درونیابی (۲-۵۲) دبی نشان می‌دهد. از آنجا که این ظرفیت گرمایی، هم در حد دمای بالا و هم در حد دمای پایین دقیق است، فرمول دبی، با وجود آنکه منحنی چگالی حالتهای واقعی فونون ممکن است به طور محسوس با فرض دبی تفاوت داشته باشد، نمایش کاملاً مناسبی از ظرفیت گرمایی اغلب جامدات ارائه می‌کند؛ این نتیجه برای مس در شکل ۲-۱۶ نمایش داده شده است. چگالی واقعی حالتها، که به وسیلهٔ منحنیهای $\omega(k)$ حاصل از پراکندگی نوترون (بخش ۱۲-۴) تعیین می‌شود، در شکل ۲-۱۶، با فرض دبی مقایسه شده است. اختلاف موجود ناشی از دو اثر اصلی است : (الف) پاشندگی صوت بسامد قطع را کاهش می‌دهد و درست مانند مثال یک بعدی (شکل ۲-۱۱) ، باعث افزایش چگالی حالتها درست زیر بسامد قطع می‌شود؛ (ب) وابستگی عدد موج قطع به راستای بلورشناسی، تیزی قطع در چگالی حالتها را از بین می‌برد به گونه‌ای که بیشینهٔ واقعی بسامد کمی بیشتر می‌شود. نتیجهٔ کلی، همان گونه که در شکل ۲-۱۶ (الف) نشان داده شده است، آن است که بیشینهٔ بسامد می‌تواند بسیار نزدیک به دمای دبی باشد، ولی مرکز گرانی توزیع واقعی بسامد پایینتر است. این به آن معناست که افزایش اصلی در ظرفیت گرمایی در دمایی پایینتر از آنچه از معادلهٔ (۲-۵۲) انتظار می‌رود، حاصل می‌شود. شکل (۲-۱۶) (الف)، نشان می‌دهد که چگالی واقعی حالتها ساختار به مراتب بیشتری از آنچه که از به کارگیری طرح درونیابی دبی حاصل می‌شود، دارد. این امر خیلی هم تعجب‌آور نیست، زیر آشکارا غیرممکن است که تمامی اطلاعات راجع به ساختار و نیروهای اتمی را تنها در یک پارامتر Θ_D ، که در نظریهٔ دبی، برای تمیز دادن ماده‌ای از مادهٔ دیگر به کار می‌رود، گنجاند.

با استفاده از معادلهٔ (۲-۵۲) برای محاسبهٔ $\theta_D(T)$ در هر دما، انحراف از نظریهٔ دبی با



شکل ۲-۱۵ ظرفیت گرمایی شبکهٔ جامد براساس پیشگویی طرح درونیابی دبی



(الف) چگالی حالتهای مربوط به مس که از آزمایشهای پراکندگی نوترون (منحنی پر) به دست آمده است. در مقایسه با چگالی حالتهای دبی (منحنی خط چین)، که از به کارگیری سرعتهای صوت حاصل از مدول کشسان اندازه‌گیری شده، محاسبه شده است.

(ب) وابستگی دمایی Θ_D برای مس که از منحنی چگالی حالتها در قسمت (الف) (منحنی پر) به دست آمده است در مقایسهٔ با نقاط آزمایشی حاصل از اندازه‌گیریهای ظرفیت گرمایی [۱] .

شکل ۲-۱۶

استفاده از ظرفیت گرمایی اندازه گیری [۲] شده به بهترین نحو بررسی می‌شود؛ دمای Θ_D غیر ثابت دبی دال بر انحراف از طرح درونیابی دبی است. درشکل ۲-۱۶(ب) عبارت $\Theta_D\,(T)$ حاصل از ظرفیت

۱- این نتایج، با اجازه، از مقالهٔ زیر اقتباس شده است.

1. E. C. Svensson, B.N. Broekhouse, and J.M. Rowe, Phys. Rev. 155, 619 (1964).

۲- به جز سهم مربوط به ارتعاشات شبکه، سایر سهم‌ها، در ظرفیت گرمایی را باید کسر کرد.

گرمایی اندازه‌گیری شده با $\Theta_D\ (T)$ حاصل از منحنی چگالی واقعی حالتهای متناظر با شکل ۲-۱۶ (الف) مقایسه شده است. دیده می‌شود که رفتار کلی بسیار مشابه است؛ اختلاف سازمان یافتهٔ جزئی به این واقعیت مربوط می‌شود که آزمایشهای نوترون $\omega\ (k)$ در دمای اتاق اندازه گرفته است و نه در دمای مربوط به اندازه‌گیریهای ظرفیت گرمایی. وابستگی دمایی $\omega(k)$، به دلیل چشم پوشی از اثرهای ناهماهنگ ظاهر می‌شود (بخش ۲-۷ را ملاحظه کنید).

از معادلهٔ (۲-۵۰) مشاهده می‌شود که بسامد دبی و در نتیجه دمای دبی با سرعت صوت در جامد متناسب است. بنابراین جامدات با چگالی پایین و مدول کشسانی بزرگ دمای دبی (Θ_D) بالایی دارند. مقادیر Θ_D برای جامدات گوناگون را می‌توان در جدول ۲-۱ یافت. هرگاه که به تخمینی از بیشینهٔ انرژی فونون در یک جامد نیاز داشته باشیم، از **انرژی دبی** $\hbar\omega_{\mathrm{D}}$ استفاده خواهیم کرد.

۲-۷ اثرهای ناهماهنگ

هر بلور واقعی، در مقابل تراکم، به حجم کمتر از حجم ترازمند بیشتر مقاومت می‌کند تا در مقابل انبساط حجم بیش از حجم ترازمند. این امر پیامدی است از شکل منحنی‌های پتانسیل بین اتمی، نظیر شکل ۱-۲۳، و انحراف قانون هوک را نشان می‌دهد، زیرا تنشهای مثبت و منفی کرنشهای هم اندازه‌ای را ایجاد نمی‌کنند. تقریب هماهنگ، که در بحثی که در گذشتهٔ مربوط به ارتعاشات شبکه در این فصل به کار برده شد، این خاصیت را تولید **نمی‌کند**، زیرا در آن به جای منحنی پتانسیل بین اتمی، از منحنی سهمی که در نقطهٔ مینیمم برازش داده شده است، [معادلهٔ (۲-۴)] استفاده کرده‌ایم. علاوه بر انحراف از قانون هوک، خواص دیگری از جامدات نیز وجود دارند که، اگر از تقریب هماهنگ استفاده شود، قابل پیشگویی نیستند. چنین خواصی را تحت نام **اثرهای ناهماهنگ** رده‌بندی می‌کنند و جملات مرتبهٔ بالاتر از پتانسیل، که در تقریب هماهنگ از آنها چشم پوشی شد، به **جملات ناهماهنگ** معروف اند. یکی از اثرهای ناهماهنگ مهم، انبساط گرمایی است؛ در تقریب هماهنگ متقارن برای پتانسیل بین اتمی، فاصلهٔ میانگین بین اتمها، با افزایش دامنهٔ ارتعاشات در اثر افزایش دما، تغییر نمی‌کند.

تقریب هماهنگ برای تفکیک حرکتهای شبکه به مدهای بهنجار مستقل ضروری است. منظور کردن جملات مرتبهٔ بالاتر در بسط سری تایلور معادلهٔ (۲-۴) منجر به جفتیدگی این مدها می‌شود. این جفتیدگی را می‌توان به منزلهٔ برخوردهای بین فونونهای مربوط به این مدها تصور کرد. این برخوردها رسانش گرمایی مربوط به شارش فونونها را محدود می‌کند. در تقریب هماهنگ، فونونها با هم برهم کنش ندارند و رسانش گرمایی در غیاب مرزها، نواقص شبکه و ناخالصی‌ها (که آنها هم فونونها را پراکنده می‌کنند) نامتناهی است.

جدول ۲-۱: مقادیر دمای دبی، Θ_D، برای جامدات گوناگون. این مقادیر از ظرفیت گرمایی در دمای پایین حاصل از به کارگیری معادلهٔ (۲-۵۴) به دست آمده‌اند.

جامد	Ar	Na	Cs	Fe	Cu	Pb	C (الماس)	KCl
$\Theta_D(K)$	۹۳	۱۵۸	۳۸	۴۵۷	۳۴۳	۱۰۵	۲۲۳۰	۲۳۵

[این اطلاعات از مرجع زیر استخراج شده‌اند[1]:]

۲-۷-۱ انبساط گرمایی

ضریب انبساط حجمی گرمایی به صورت زیر تعریف می‌شود[2]

$$\beta=\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P \qquad (۲-۵۵)$$

برای توضیح اینکه چرا β در حدهماهنگ صفر می‌شود و برای اینکه، مقدار آن را در حالت کلی‌تر بررسی کنیم، β را به صورت مفیدتر زیر باز می‌نویسیم:

$$\beta=-\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V=\frac{1}{B}\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \qquad (۲-۵۶)$$

$$B=-V\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T \qquad (۲-۵۷)$$

مدول حجمی است و آن مدول کشسانی است که تغییر حاصل از اعمال فشار را مشخص می‌کند. بنابراین برای محاسبهٔ انبساط، لازم است وابستگی حجم و دما را به فشار معین کنیم. فشار را می‌توان از انرژی آزاد هلمهولتز $F=U-TS$ و با استفاده از رابطهٔ زیر محاسبه کرد:

$$p=-\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T \qquad (۲-۵۸)$$

در تقریب هماهنگ داریم

$$F=E_{\text{پتانسیل}}+F_{\text{مدها}} \qquad (۲-۵۹)$$

که در آن $E_{\text{پتانسیل}}$ انرژی پتانسیل مستقل از دمای مربوط به برهم کنشهای بین اتمی و $F_{\text{مدها}}$ انرژی آزاد مربوط به ارتعاشات شبکه است. f، سهم یک مد ارتعاش شبکه در $F_{\text{مدها}}$ را

۱– *American Institute of Physics Handbook, 3rd edn., McGraw-Hill, New York (1972).*

۲– ضریب انبساط خطی $\beta/3$ است.

می‌توان از تابع پارش (مندل [۲] فصل ۶) نوسانگر هماهنگ ساده [معادلهٔ (۲-۲۵)] محاسبه کرد

$$f=-k_B T\ ln\ Z=\frac{1}{2}\ \hbar\omega+k_B T\ ln\ [1-exp(-\hbar\omega/k_B\ T)] \qquad (۲-۶۰)$$

در تقریب هماهنگ، بسامد یک مد ارتعاش مستقل از حجم است[1] ؛ بنابراین f و در نتیجه $F_{\text{مدها}}$ به حجم بستگی ندارند و ارتعاشات شبکه در فشار سهیم نیست [(۲-۵۸)] و از این رو ارتعاشات شبکه در انبساط گرمایی سهمی ندارد [معادلهٔ (۲-۵۶)]. هر چند جملهٔ $E_{\text{پتانسیل}}$ در F به حجم بستگی دارد و در نتیجه در فشار سهیم است، مستقل بودن از دما متضمن آن است که سهمی در انبساط گرمایی ندارد. از این رو انبساط گرمایی، در حد هماهنگ، صفر است.

یکی از اثرهای جملات ناهماهنگ آن است که سبب می‌شود بسامدهای مدهای ارتعاش شبکه به حجم بستگی داشته باشند، در جایی که انبساط گرمایی مورد توجه است، این اثر مهمی است. بنابراین، از جفتیدگی مدها چشم می‌پوشیم و می‌پذیریم که F هنوز به شکل معادلهٔ (۲-۵۹) است که در آن سهم هر یک از مدها با معادلهٔ (۲-۶۰) بیان می‌شود . بنابراین، با استفاده از معادلهٔ (۲-۵۸) فشار عبارت است از

$$p=\frac{dE_{\text{پتانسیل}}}{dV}-\sum_{\text{مدها}}\frac{\partial f}{\partial V}$$

$$=-\frac{dE_{\text{پتانسیل}}}{dV}-\sum_{\text{مدها}}\hbar\frac{\partial\omega}{\partial V}\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{exp(\hbar\omega/k_B\ T)-1}\right) \qquad (۲-۶۱)$$

در نتیجه وابستگی بسامدهای مد شبکه به حجم به صراحت از طریق مشتق $\partial\omega/\partial V$ ظاهر می‌شود.

ساده‌ترین فرض آن است که بپذیریم تمامی بسامدهای مدهای شبکه، وابستگی حجمی یکسانی دارند و این وابستگی را بتوان با قانون توانی ساده $\omega \propto V^{-\gamma}$ نمایش داد. معمولتر آن است که این وابستگی به صورت زیر نوشته شود:

$$\frac{d\,(ln\,\omega)}{d(ln\ V)}=-\gamma \qquad (۲-۶۲)$$

نمای بی‌بعد γ به پارامتر **گرون‌آیزن** موسوم است و می‌توان آن را به منزلهٔ مقیاسی از شدت

۱- این مطلب را می‌توان، با محاسبهٔ مجدد ارتعاشات و با استفاده از تقریب هماهنگ در مورد بلور یک بعدی بخش ۲-۳-۱ در وضعیتی، که در آن بلور تحت تأثیر یک کشش به نحوی است که فاصلهٔ شبکه‌ای متوسط بیش از a شود، به صراحت آزمود. محاسبهٔ ساده‌تری، که همین اصل فیزیکی را بیان می‌کند، آن است که نشان دهیم بسامد ارتعاش جرمی، که به یک فنر آویزان است، روی زمین و روی ماه، یکسان است.

اثرهای ناهماهنگ تلقی کرد؛ در زیر نشان می‌دهیم که چگونه این پارامتر را می‌توان محاسبه کرد. با استفاده از معادلهٔ (۲-۶۲)، خواهیم داشت $\partial\omega/\partial V = -\gamma\omega/V$ و از جاگذاری این مقدار در معادلهٔ (۲-۶۱) چنین به دست می‌آید:

$$p = -\frac{dE_{\text{پتانسیل}}}{dV} + \frac{\gamma}{V}\sum_{\text{مدها}}\left(\frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/k_B T)-1}\right) = -\frac{dE_{\text{پتانسیل}}}{dV} + \frac{\gamma E_{\text{مدها}}}{V} \qquad (۲\text{-}۶۳)$$

که در آن انرژی $E_{\text{مدها}}$ ارتعاشات شبکه، با استفاده از معادلهٔ (۲-۶۲) مشخص شده است. با درج این عبارت فشار در معادلهٔ (۲-۵۶) و با توجه به اینکه $E_{\text{پتانسیل}}$ به دما بستگی ندارد، ضریب انبساط را به صورت زیر به دست می‌آوریم

$$\beta = \frac{\gamma}{BV}\left(\frac{\partial E_{\text{مدها}}}{\partial T}\right)_V = \frac{\gamma C_V}{BV} \qquad (۲\text{-}۶۴)$$

که در آن C_V ظرفیت گرمایی شبکه در **حجم ثابت** است؛ اثر ناهماهنک دیگری که از وابستگی بسامدهای ارتعاش شبکه ناشی می‌شود، آن است که ظرفیت گرمایی اندازه‌گیری شده در حجم ثابت با ظرفیت گرمایی اندازه‌گیری شده در فشار ثابت متفاوت است.

از آنجا که مدولهای کشسانی، از قبیل مدول حجمی، فقط به طور ضعیف، به دما بستگی دارند، معادلهٔ (۲-۶۴) پیشگویی می‌کند که وابستگی دمایی ضریب انبساط تقریباً همان وابستگی دمایی ظرفیت گرمایی است. گرون‌آیزن برای اولین‌بار، به طور تجربی به این خصلت رسید. به همین دلیل معادلهٔ (۲-۶۴) به **قانون گرون آیزن** موسوم است و اغلب جامدات به خوبی از آن پیروی می‌کنند. مقدار $\beta BV/C_V$، که طبق معادلهٔ (۲-۶۴) باید ثابت باشد، نوعاً بین ۱ تا ۳ است و وابستگی دمایی خفیفی دارد.

برای تخمین یک مقدار نظری برای γ، به این نکته توجه می‌کنیم که در مدل یک بعدی سادهٔ ارتعاشات شبکه، بسامدهای مدها با $K^{1/2}$ متناسب است [برای مثال (۲-۹) و (۲-۲۱) را ملاحظه کنید]، که در آن K ثابت فنر مربوط به فنرهای متصل کنندهٔ اتمهاست. با قطع کردن بسط سری تیلور پتانسیل بین اتمی [معادلهٔ (۲-۴)] در جملهٔ مرتبه دوم، ثابت فنر به دست می‌آید که به فاصلهٔ میانگین بین اتمها بستگی ندارد. ولی اگر سری تیلور معادلهٔ (۲-۴) را ادامه دهیم تا اولین جملهٔ ناهماهنگ را نیز شامل شود

$$\mathscr{V}(r) = \mathscr{V}(a) + \frac{(r-a)^2}{2}\left(\frac{d^2\mathscr{V}}{dr^2}\right)_{r=a} + \frac{(r-a)^3}{6}\left(\frac{d^3\mathscr{V}}{dr^3}\right)_{r=a} \qquad (۲\text{-}۶۵)$$

در آن صورت ثابت فنر برای ارتعاشات حول فاصلهٔ میانگین a به قرار زیر است:

$$K = \left(\frac{d^2 \mathcal{V}}{dr^2}\right)_{r=a} = \left(\frac{d^2 \mathcal{V}}{dr^2}\right)_{r=a} + (a' - a)\left(\frac{d^3 \mathcal{V}}{dr^3}\right)_{r=a} \qquad (۶۶\text{-}۲)$$

از این رو، پارامتر گرون آیزن، که اثر جملهٔ ناهماهنگ روی وابستگی حجمی بسامدهای ارتعاشی شبکه را توصیف می‌کند از معادلهٔ (۲-۶۲) مطابق زیر به دست می‌آید:

$$\gamma = -\frac{\mathcal{V}}{\omega}\frac{\delta\omega}{\delta V} = -\frac{a}{3\omega}\frac{\delta\omega}{\delta a} = -\frac{a}{6K}\frac{\delta K}{\delta a}$$

$$= -\frac{a}{6}\left(\frac{d^3 \mathcal{V}}{dr^3}\right)_{r=a} \Big/ \left(\frac{d^2 \mathcal{V}}{dr^2}\right)_{r=a} \qquad (۶۷\text{-}۲)$$

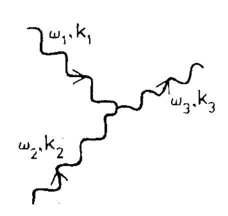
که در آن از $V \propto a^3$، $\omega \propto K^{\frac{1}{2}}$ و معادلهٔ (۲-۶۶) در به دست آوردن $\delta K/\delta a$ استفاده شده است. مسئلهٔ (۲-۷) محاسبه‌ای از γ برای یک بلور گاز بی‌اثر است. انحنای پتانسیل بین اتمی اساساً مدولهای کشسانی بلور را معین می‌کند و از این رو مشاهده می‌کنیم که یک اثر ناهماهنگ آن است که موجب وابستگی مدولهای کشسانی به حجم و در نتیجه به فشار می‌شود.

این امر که اثر ناهماهنگی روی تمام مدها یکسان نیست، از وجود **مدهای نرم** در برخی از جامدات بلوری روشن می‌شود؛ یک مد نرم مدی است که برای آن ناهماهنگی باعث می‌شود که بسامد در دمای متناهی ویژه‌ای صفر شود. وقتی این امر روی می‌دهد، جابه جایی‌های اتمی مربوط به این مد مستقل از زمان می‌شوند و بنابراین یک جابه جایی دائمی اتمها روی می‌دهد. این پدیده نوعاً برای یک مداپتیکی عرضی با عدد موج صفر (طول موج بینهایت) اتفاق می‌افتد؛ در این حالت هر یاختهٔ یکه تحت تأثیر تغییرات یکسانی قرار می‌گیرد (هر چند جابه‌جایی اتمهای مختلف موجود در هر یاخته متفاوت است). از این رو مد نرم‌ساز و کاری را برای گذار فاز از یک ساختار بلوری به ساختار دیگر فراهم می‌آورد؛ چنین گذاری به **گذار فاز جابه جا شونده** شهرت دارد. تغییرات اندازه‌گیری شده بسامد یک مد نرم در مجاورت گذار فاز جابه‌جا شونده را می‌توان در شکل (۹-۱۲) یافت.

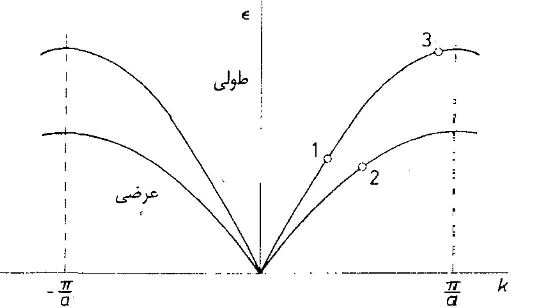
در تمام حالتها، فاز دمای بالا از تقارن بالاتری برخوردار است؛ با کاهش دما از مقدار بحرانی، جابه‌جایی مربوط به فاز نرم شروع به افزایش می‌کند. در جامدات یونی، جابه‌جایی خلاف هم یونهای مثبت و منفی مربوط به مد نرم اپتیکی عرضی با عدد موج صفر سبب می‌شود فاز با دمای پایینتر یک قطبش الکتریکی دائمی داشته باشد؛ در این صورت فاز با دمای پایین **فروالکتریک** است (بخش ۹-۲ را ملاحظه کنید).

۲-۷-۲ برخورد فونون - فونون

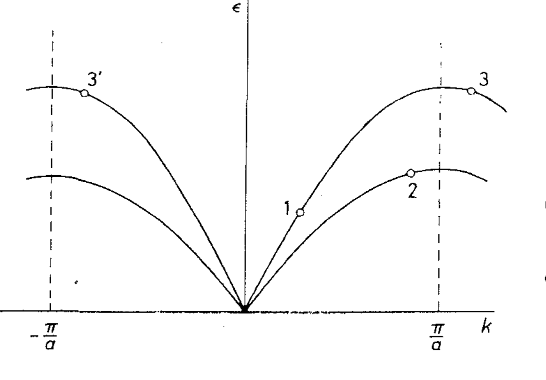
جفتیدگی مد بهنجار حاصل از جملات ناهماهنگ در نیروهای بین اتمی را می‌توان به منزلهٔ برخوردهای بین فونونهای مربوط به مدها تصور کرد. یک فرایند نوعی برخورد در شکل ۲-۱۷ (الف) نشان داده شده است؛ فونونی با عدد موج k_1 و بسامد ω_1 با فونونی به عدد موج k_2 و بسامد ω_2 ادغام می‌شود و فونونی با عدد موج k_3 و بسامد ω_3 تولید می‌کند. در زیر نشان



(الف) یک برخورد که در آن فونونهای ۱ و ۲ در هم ادغام می‌شوند تا فونون ۳ ایجاد شود.



(ب) در یک فرایند بهنجار، فونون ۳ دارای $|\mathbf{k}| < \pi/a$ است.



(ج) در یک فرایند واگرد، عدد موج فونون ۳ از شرط $|k| > \pi/a$ برخوردار است و هم ارز فونون '۳ است که برای آن $|\mathbf{k}| < \pi/a$ است.

شکل ۲-۱۷

می‌دهیم که در یک بلور یک بعدی این فرآیند با معادلات زیر توصیف می‌شود:

$$\omega_3 = \omega_1 + \omega_2 \qquad (۶۸-۲)$$

$$k_3 = k_1 + k_2 \qquad (۶۹-۲)$$

این معادلات تفسیر فیزیکی ساده‌ای دارند؛ وقتی آنها را در $\hbar$ ضرب کنیم، شبیه قوانین پایستگی انرژی و اندازه حرکت خطی برای برخورد فونونها به نظر می‌رسند[1]. لازم است معادلهٔ (۲-۶۹) اصلاح‌شود، تادرآن‌این‌قراردادکه‌فونونهابااعدادموج‌درگسترهٔ $-\pi/a < k < \pi/a$ نمایش‌داده‌می‌شوند، منظور شود. چنانچه k_3 در خارج این گسترهٔ واقع شود، در آن صورت باید مضرب مناسبی از $2\pi/a$ را به آن افزود تا به درون این گستره آورده شود. آنگاه معادلهٔ (۲-۶۹) به صورت

$$k_3 \pm n\,(2\pi/a) = k_1 + k_2 \qquad (۷۰-۲)$$

در می‌آید، که در آن k_1 ، k_2 و k_3 همگی در گسترهٔ بالا هستند. تعمیم سه بعدی جملهٔ $\pm\, n\,(2\pi/a)$ در بخش ۴-۱۱ آورده شده است. [معادلهٔ (۱۲-۸) را نیز ملاحظه کنید]. در می‌یابیم که معادلهٔ (۲-۷۰) در مورد برخوردهای انواع دیگر ذرات موجود در یک بلور، مثل الکترونها، نیز برقرار است.

متداول است که فرآیندهایی، که برای آنها $n=0$ است و **فرآیندهای بهنجار** نامیده می‌شوند و فرآیندهایی که برای آنها $n \neq 0$ است و **فرآیندهای واگرد**[2] نامیده می‌شوند را از هم تمیز دهیم. این دو نوع فرایند در شکل‌های ۲-۱۷ (ب) و (ج) نشان داده شده‌اند. برای برقراری همزمان معادلات (۲-۶۸) و (۲-۷۰)، لاجرم فونونهای عرضی یک بعدی را مطرح کرده‌ایم؛ برای یک تک منحنی $\omega(k)$ که در همه جا تقعر به سوی پایین دارد، دو فونون نمی‌توانند به گونه‌ای ترکیب شوند که اندازه حرکت خطی کافی را به فونونی، که انرژی ترکیب یافتهٔ آنها را داشته باشد، بدهند. افزودن جملهٔ اضافی در معادلهٔ (۲-۶۹) و تبدیل آن به معادلهٔ (۲-۷۰) بازهم حکایت از آن دارد که اندازه حرکت خطی بلور $\hbar k$ ، اندازه حرکت خطی واقعی یک فونون نیست. خوانندگانی که معادلات (۲-۶۸) و (۲-۶۹) را، براساس اعتماد، می‌پذیرند، می‌توانند اثباتی راکه در ادامه خواهد آمد حذف کنند.

ساز و کار جفتیدگی مدهای شبکه را، در صورتی می‌توان درک کرد که، از بخش (۲-۷-۱) به یاد آوریم که اثرهای ناهماهنگ سبب می‌شوند ثابتهای کشسانی یک بلور به چگالی، یا ،کلی‌تر بگوییم، به حالت کرنش بلور بستگی داشته باشند؛ بنابراین سرعت صوت نیز تحت تأثیر حالت کرنش قرار می‌گیرد. از این رو، اگر یک موج صوتی از بلوری بگذرد که موج صوتی دیگری از قبل

۱- در بلور سه بعدی، اعداد موج ظاهر شده در معادلهٔ (۲-۶۹) را باید با بردار موج مربوط به فونونهاجایگزین کرد.

۲- واگرد ترجمهٔ کلمهٔ آلمانی *Umklapp* و به معنای برگردانیدن است. (توضیح مترجمان).

در آن حضور داشته باشد، جبهۀ موج آن به وسیلۀ این اثر مدولۀ فازی خواهد شد. برای مشاهدۀ این امر، موجی با بسامد ω_1 و عدد موج k_1 در نظر می‌گیریم که این موج در بسامد ω_2 و عدد موج k_2 مدولۀ فازی شده است:

$$A = exp\{i\ [k_1 x + C cos(k_2 x - \omega_2 t) - \omega_1 t]\} \qquad (۲-۷۱)$$

که در آن C میزان مدوله شدگی را مشخص می‌کند. سرعت فاز این موج با نوشتن این معادله برای یک جبهۀ موج، یا یک سطح با فاز ثابت، به صورت،

$$k_1 x + C\ cos(k_2 x - \omega_2 t) - \omega_1 t = \text{ثابت}$$

و با مشتق‌گیری از آن نسبت به زمان، تعیین می‌شود:

$$k_1 \frac{dx}{dt} - -k_2 \frac{dx}{dt}\ C sin(k_2 x - \omega_2 t) + \omega_2 C sin(k_2 x - \omega_2 t) - \omega_1 = 0$$

در نتیجه سرعت فاز عبارت است از

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\omega_1 - \omega_2 sin(k_2 x - \omega_2 t)}{k_1 - k_2 C sin(k_2 x - \omega_2 t)} \qquad (۲-۷۲)$$

از این رو، در غیاب مدوله شدن فازی، سرعت فاز ω_1/k_1 است؛ جمله‌های اضافی در صورت و مخرج کسرمعادلۀ(۲-۷۲) مبین مدوله شدن سرعت فاز در بسامد ω_2 و عدد موج k_2 است، که مناسب بلوری است که حاوی یک موج صوتی با همین بسامد و همین عدد موج است. C شدت مدوله‌شدن به‌دامنۀ موج با بسامد ω_2 و عدد موج k_2، به میزان ناهماهنگی بستگی دارد.

برای بررسی مفاهیم و پیامدهای مدوله شدن فازی، فرض می‌کنیم که C آنقدر کوچک باشد که بتوان معادلۀ (۲-۷۱) را به صورت یک سری از توانهای C بسط داد؛ یعنی

$$A = exp[i(k_1 x - \omega_1 t)][1 + iC\ cos(k_2 x_2 t) + \dots]$$

$$= exp\ [i\ (k_1 x - \omega_1 t)] + \frac{1}{2} i C\ exp\{i[k_1 + k_2)x - (\omega_1 + \omega_2)t]\} \qquad (۲-۷۳)$$

$$+ \frac{1}{2} i C\ exp\{i\ [k_1 - k_2)x - (\omega_1 - \omega_2)t]\} + \text{جملات از مرتبۀ } C^2$$

اولین جمله، موج صوتی اصلی با بسامد ω_1 و عدد موج k_1 است؛ دومین جمله، موج جدیدی است که بسامد ω_3 ی آن با معادلۀ (۲-۶۸) و عدد موج k_3 ی آن با معادلۀ (۲-۶۹) بیان می‌شوند. اگر $\omega_3(k_3)$ نقطه‌ای واقع بر منحنی پاشندگی فونون باشد، این موج جدید می‌تواند انتشار یابد و لذا عبارت دوم در معادلۀ (۲-۷۳) بیانگر فرآیند نشان داده شده در شکل ۲-۱۷(الف) خواهد بود. سومین جمله در معادلۀ (۲-۷۳) مربوط به فرآیندی است که در آن فونونی با عدد

موج k_1 فونونی با عدد موج k_2 **گسیل** می‌دارد و خود به یک فونون ؛ با عدد k_3 تبدیل می‌شود. بنابراین این دو فرایند معکوس یکدیگرند؛ یا دو فونون در هم ادغام می‌شوند تا یک فونون بسازنند، یا یک فونون به دو فونون تفکیک می‌شود؛ آنها هر دو **فرایندهای سه فونونی** هستند. جملات از مرتبهٔ C^2 و بالاتر در معادلهٔ (۲-۷۳) مربوط به فرایندهایی هستند که در آنها چهار فونون یا بیشتر درگیر هستند؛ این فرایندهای مرتبهٔ بالاتر را بیش از این بحث نخواهیم کرد. می‌بینیم صحیحتر است که معادلهٔ (۲-۶۹) را به عنوان شرط هندسی تداخل روی اعداد موج تلقی کنیم تا به منزلهٔ اصل پایستگی اندازه حرکت خطی.

۲-۸ رسانش گرمایی به وسیله فونونها

وقتی شیب دما در یک جامد وجود داشته باشد، گرما از ناحیهٔ داغتر به ناحیهٔ خنکتر شارش می‌کند. در جامدی، که از نظر الکتریکی عایق است، مهمترین سهم در رسانش گرمایی از **شارش فونونها** ناشی می‌شود. رسانش گرمایی مثالی از یک **خاصیت ترابردی** است. خاصیت ترابردی عبارتی است که برای توصیف هر فرایندی، که در آن شارش هر کمیتی روی دهد، به کار برده می‌شود. ضریبی مانند رسانندگی گرمایی، که شارش را توصیف می‌کند، به **ضریب ترابرد** موسوم است. از نظریهٔ جنبشی مقدماتی، ضرایب ترابرد گازها، برای محاسبهٔ رسانندگی گرمایی گاز فونونی موجود در یک جامد استفاده خواهیم کرد.

۲-۸-۱ نظریهٔ جنبشی

در نظریهٔ جنبشی مقدماتی گازها، با فرض ثابت بودن سرعت میانگین مولکولها $\overline{v}$ نشان داده می‌شود که شار حالت ایستای خاصیتی چون P در جهت z به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\text{شار} = \frac{1}{3}\, l\overline{v}\ \frac{dp}{dz} \qquad \textbf{(۲-۷۴)}$$

که در آن l مسافت آزاد میانگین است، و ضریب $\frac{1}{3}$ از متوسط گیری روی زاویه ناشی می‌شود (به عنوان مثال مرجع ۱ را ملاحظه کنید). در ساده‌ترین حالت که در آن P چگالی تعداد ذرات باشد، ضریب ترابرد حاصل از معادلهٔ (۲-۷۴) همان ضریب پخش $D=\frac{1}{3}\,l\overline{v}$ است. اگر P چگالی انرژی E باشد، آنگاه شار W، شارش گرما از واحد سطح است. در نتیجه

$$W=\frac{1}{3}\,l\overline{v}\ \frac{dE}{dz} = \frac{1}{3}\ \overline{v}\ \ l\frac{dE}{dT}\ \ \frac{dT}{dz}$$

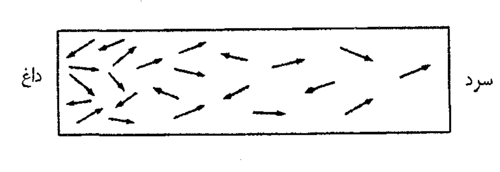
حال dE/dT گرمای ویژهٔ C به **ازای واحد حجم** است، در نتیجه رسانندگی گرمایی به صورت زیر داده می‌شود.

$$K=\frac{1}{3}\,\overline{v}\ lC \qquad \textbf{(۲-۷۵)}$$

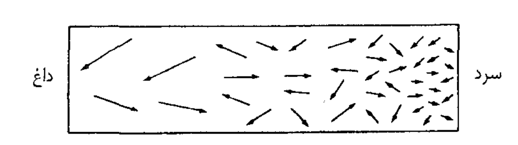
در هیچ یک از مراحل استخراج معادله (۲-۷۵) از پایستگی ذرات استفاده نشده است، لذا این معادله را می‌توان در مورد گاز فونونی درست مانند یک گاز حقیقی، به کاربرد؛ این موضوع در واقع در مورد گاز فونونی کارایی خوبی دارد، زیرا $\bar{v}$، برای فونونهای با عدد موج نه چندان بزرگ، تقریباً ثابت است (سرعت صوت). برای یک گاز حقیقی از اتمها، به کاربردن معادلهٔ (۲-۷۵)، به چند دلیل، چندان آسان و سرراست نیست. نخست اینکه، $\bar{v}$ به دما بستگی دارد و این باید در به دست آوردن معادلهٔ (۲-۷۴) به حساب آورده شود؛ دوم اینکه، پایستگی اتمها این قید را اعمال می‌کند که هیچ شار خالصی از ذرات وجود نداشته باشد؛ آخر اینکه، تعادل هیدرواستاتیکی مستلزم آن است که فشار یکنواخت باشد. بنابراین نظریهٔ رضایت بخشی برای رسانش گرما در گاز حقیقی کاملاً مشکل است و نتیجه می‌شود که ضریب عددی صحیح در معادلهٔ (۲-۷۵)، در این مورد، با $\frac{1}{3}$ تفاوت دارد. در مورد فونونها؛ نظریهٔ ساده به مراتب بهتر است.

تفاوتهای اساسی بین فرایندهای رسانش گرما در یک گاز فونون با رسانش در یک گاز حقیقی در شکل (۲-۱۸) نشان داده شده‌اند. برای فونونها [شکل ۲-۱۸ (الف)]، سرعت تقریباً ثابت است. ولی هم چگالی تعداد و هم چگالی انرژی، در انتهای داغ، مقادیر بزرگتری دارند؛ شارش گرما عمدتاً ناشی از شارش فونونهاست که در آن فونونها در انتهای داغ ایجاد و در انتهای سرد نابود می‌شوند. در مقابل در گاز حقیقی [شکل ۲-۱۸ (ب)] هیچ شارشی از ذرات موجود نیست. سرعت متوسط و انرژی جنبشی به ازای هر ذره، در انتهای داغ بزرگتر است، ولی چگالی تعداد در انتهای خنک بیشتر است و چگالی انرژی در واقع **یکنواخت** است (چرا که فشار یکنواخت‌است). شارش گرما صرفاً به وسیله انتقال انرژی جنبشی از یک ذره به ذرهٔ دیگر، درحین برخوردها، صورت می‌گیرد؛ این امر، در مورد فونون، اثری تقریباً جزئی است.

حال برای بحث پیرامون وابستگی دمایی رسانندگی گرمایی گاز فونونی، از معادلهٔ (۲-۷۵) استفاده می‌کنیم. فرض می‌کنیم که $\bar{v}$ تقریباً برابر سرعت صوت و در نتیجه مستقل از دماست. وابستگی دمایی ظرفیت گرمایی C_V شبکه در بخش ۲-۶ بحث شده است. بنابراین، باید وابستگی دمایی مسافت آزاد میانگین l فونون را تعیین کنیم. مسافت آزاد میانگین، به جز در دماهای بسیار پایین از برخوردهای فونون-فونون به دست می‌آید. از آنجا که شارش گرما وابسته به شارشی از فونونها است، مؤثرترین برخوردهایی، که شارش را محدود می‌کنند، آنهایی هستند که در آنها سرعت گروه فونون معکوس می‌شود. آشکار است که فرایندهای با این خاصیت همان فرایندهای واگرد هستند (شکل ۲-۱۷)، و بنابراین، این فرآیندها هستند که در محدود کردن رسانندگی گرمایی از اهمیت برخوردارند. ولی، تمایز جدی بین فرایندهای بهنجار و واگرد تا حدودی تصنعی است، زیرا فونونهای با k ی اندکی کمتر از π/a و با k ی اندکی بزرگتر از π/a واقعاً بسیار مشابه‌اند؛ سرعت گروه هر دو کوچک است و هر دو سهم اندکی در شارش انرژی دارند. شارش



(الف) در یک گاز فونونی شارش خالص فونون وجود دارد و فونونهای بیشتری در انتهای داغ موجوداند.



(ب) در یک گاز حقیقی، هیچ شارش خالصی از اتمها وجود ندارد؛ اتمها در انتهای داغ کمتر ولی سریعتراند.

شکل ۲-۱۸ رسانش گرما در گاز فونونی و گاز حقیقی

انرژی با جمع زدن

$$\hbar\omega \;\; d\omega/dk = \text{سرعت فونون} \times \text{انرژی فونون}$$

روی تمام فونونها متناسب است و این کمیت به وسیله **هر دو** فرایند سه فونونی شکل ۲-۱۷ کاهش می‌یابد.

ولی این درست است که اگر هیچ فرایند واگردی موجود نباشد، شارش انرژی، حتی در غیاب شیب دما، **به طور آماری** ایستا خواهد بود؛ در نتیجه، رسانندگی گرمایی نامتناهی خواهد شد! برای تحقیق این مطلب، دقت می‌کنیم که در غیاب فرایندهای واگرد، برخوردهای فونونها با معادلاتی چون (۲-۶۹) [یا هم ارزهای سه بعدی این معادلات] توصیف می‌شوند، که پایستگی اندازه حرکت خطی بلور را در هر برخورد توضیح می‌دهند. از این رو، در هر حالتی که در آن شارشی از فونونها وجود داشته باشد، اندازه حرکت بلوری فونون

$$\mathbf{P} = \sum n(\mathbf{k})\hbar\mathbf{k}$$

با وقوع برخوردها، پایسته می‌ماند. شارش گرمای وابسته به شارش فونونها هم بدون تغییر می‌ماند. بنابراین برای متناهی ماندن رسانندگی، وقوع فرایندهای واگرد، که با $n \neq 0$ در معادلهٔ (۲-۷۰) (و هم ارز سه بعدی آن) توصیف می‌شوند، ضروری است.

۲-۸-۲ رسانش در دماهای بالا

در دماهای به مراتب بزرگتر از دمای دبی، Θ_D ، ظرفیت گرمایی به وسیلهٔ نتیجهٔ کلاسیکی مستقل از دما، معادلهٔ (۲-۴۳) بیان می‌شود. طبیعی است متوقع باشیم که آهنگ برخورد بین دو

فونون با چگالی فونون متناسب باشد،* ولی اگر برخوردهایی ک در آنها تعداد بیشتری فونون درگیراند، حائز اهمیت باشند، در آن صورت آهنگ پراکندگی، افزایش سریعتری با چگالی فونونی خواهد یافت. در دماهای بالا، انرژی متوسط فونون ثابت و انرژی کل شبکه با T متناسب است؛ این به آن معناست که تعداد فونونها با T متناسب است. در نتیجه انتظار داریم که آهنگ پراکندگی با T متناسب باشد و مسافت آزاد میانگین به صورت T^{-1} تغییر کند. بنابراین، با استفاده از معادلهٔ (۲-۷۵)، رسانندگی گرمایی باید به صورت T^{-1} (یا در صورتی که برخوردهای شامل تعداد بیشتری از فونونها نیز مهم باشند، به صورت T^{-x} با $x \geq 1$) تغییر کند. شکل ۲-۱۹ (الف) نشان می‌دهد که نتایج تجربی در دماهای بالا به سوی این رفتار میل می‌کنند.

۲-۸-۳ رسانش در دماهای میانی

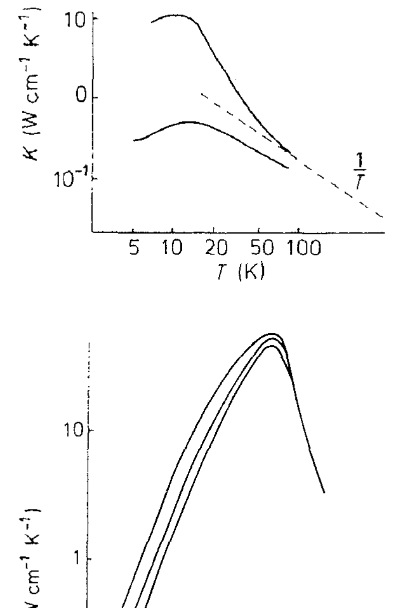
شکل ۲-۱۹ (الف) همچنین نشان می‌دهد که، رسانندگی، در دماهای کمتر از حدود Θ_D، با وجود کاهش ظرفیت گرمایی در این ناحیه، با کاهش دما افزایش تیزتری دارد. اگر به یادآوریم که فرایندهای واگرد، برای اینکه برخوردهای فونون در محدود کردن رسانندگی مؤثر باشند، اساسی‌اند، مطلب فوق را می‌توان فهمید. از شکل ۲-۱۷ دیده می‌شود که فرایندهای واگرد تنها در صورتی روی می‌دهند که فونونهای با انرژی کافی موجود باشند تا فونونی با $k_3 > \pi / a$ ایجاد کنند. این مستلزم داشتن فونونهایی با انرژی قابل مقایسه با انرژی $k\Theta_D$ دبی است. بنابراین، انرژی فونونهای مربوط دقیقاً تعریف نمی‌شود، ولی می‌توان انتظار داشت که، وقتی $T << \Theta_D$، تعداد این فونونها تقریباً به صورت $exp\,(-\Theta_D / bT)$ تغییر کند، که در آن b عددی از مرتبهٔ واحد است. بنابراین انتظار داریم مسافت آزاد میانگین به صورت $exp\,(+\Theta_D / bT)$ تغییر کند؛ این عامل نهایی، از هر وابستگی توانی پایینی از T در رسانندگی گرمایی، نظیر عامل T^3 ناشی از ظرفیت گرمایی، عمده‌تر است. از نظر تجربی، این تغییرات، در گسترهٔ مناسبی از دما، به همین منوال است؛ مقادیر تجربی b از مرتبهٔ ۲ یا ۳ هستند.

۲-۸-۴ رسانش در دماهای پایین

به دلیل کاهش نهایی تعداد فونونهای با انرژی بالا، که برای وقوع فرایندهای واگرد ضروری هستند، مسافت آزاد میانگین در برخوردهای فوتون - فونون، در دماهای پایین بسیار بزرگ

---

*- این مطلب، به وسیلهٔ معادلهٔ (۲-۷۳)، که در آن امواج پراکنده شده "سه فونونی" با C و در نتیجه با دامنهٔ موجی که موجب پراکندگی می‌شود، متناسب‌اند، تأیید می‌شود؛ از این رو شدت پراکنده شده با شدت موج پراکننده و از آنجا با تعداد فونونهای وابسته به آن متناسب است. فرایندهای مرتبهٔ بالاتر موجود در معادلهٔ (۲-۷۳) به توانهای بالاتر C بستگی دارند و بنابراین شدت پراکنده شدهٔ حاصل به توانهای بالاتری از چگالی فونون بستگی دارد.



(الف) رسانندگی گرمایی بلور کوارتز؛ منحنی پایین اثر نواقص شبکه‌ای را در نمونه‌ای نشان می‌دهد که تحت تابش نوترون قرار گرفته است. [با کسب اجازه از برمن[1]].

(ب) رسانندگی گرمایی میله‌های یا قوت کبود مصنوعی با قطرهای متفاوت. [با کسب اجازه از برمن و همکارانشان[2]]

شکل ۲-۱۹

می‌شود و سرانجام از ابعاد بلور بیشتر می‌شود. در این صورت، مسافت آزاد میانگین، در یک تک بلور با کیفیت عالی، به وسیله برخورد با سطح نمونه، محدود می‌شود و شارش فونونها همانند شارش یک گاز حقیقی در رژیم نادسن[3] می‌شود. در این صورت مسافت آزاد میانگین مؤثر فونون، که باید در معادلهٔ (۲-۷۵) به کار رود، از مرتبهٔ قطر نمونه است؛ حتی، اگر سطح نمونه به قدر کافی، برای وقوع محسوس بازتاب آینه وار فونونها، صیقلی باشد، این مسافت بزرگتر هم می‌تواند باشد، زیرا بازتاب آینه‌وار سهمی در مقاومت گرمایی ندارد. در این حد، هیچ رسانندگی

۱- *R. Berman, Proc. R. Soc. A 208, 90 (1951).*

۲- *R. Berman, E.L. Foster and J.M. Ziman, Proc. R. Soc. A 231, 130 (1955).*

۳- *Knudson*

گرمایی واقعی‌ای وجود ندارد، زیرا معادلهٔ (۲-۷۵) مقداری را پیشگویی می‌کند که به اندازه نمونه بستگی دارد؛ **ضریب رسانندگی** گرمایی، به جای مجذور، با مکعب قطر نمونه متناسب می‌شود. تغییرات رسانندگی مؤثر با قطر در شکل ۲-۱۹ (ب) نشان داده شده است. در این حالت تنها وابستگی دمایی در رسانندگی از ظرفیت گرمایی ناشی می‌شود، که در این ناحیه از قانون T^3 دبی [معادلهٔ (۲-۵۴)] پیروی می‌کند. وابستگی ضریب ترابرد به شکل و اندازهٔ بلور، که وقتی پیش می‌آید که مسافت آزاد میانگین با ابعاد نمونه قابل مقایسه شود، به **اثر اندازه** موسوم است.

اگر نمونه تک بلور کامل نباشد و ناکاملیهایی، از قبیل دررفتگی، مرزدانه‌ای، ناخالصی داشته باشد، در آن صورت این ناکاملیها؛ نیز فونونها را پراکنده خواهند کرد. طول موج فونون غالب، در دماهای بسیار پایین آنقدر بزرگ می‌شود که این ناکاملیها؛ عملاً پراکننده نخواهند بود، به گونه‌ای که رسانندگی گرمایی، در این دماها، همواره یک وابستگی T^3 دارد ولی رسانندگی بیشینه بین ناحیهٔ T^3 و ناحیهٔ $exp(\Theta_D/bT)$ عمدتاً به وسیلهٔ ناکاملیها؛ کنترل می‌شود. بیشینه برای یک نمونهٔ ناخالص یا بس بلورین، می‌تواند پهن و کوتاه باشد [شکل ۲-۱۹ (الف)]، در حالی که، برای تک بلوری که به دقت تهیه شده باشد، همان گونه که در شکل ۲-۱۹ (ب) نشان داده شده است، این بیشینه کاملاً تیز است و رسانندگی به مقدار بسیار بالایی می‌رسد، که از مرتبهٔ رسانندگی مس فلزی است، که در آن رسانندگی عمدتاً از الکترونهای رسانش ناشی می‌شود (بخش ۳-۳).

مسایل ۲

۲-۱ نشان دهید که رابطهٔ پاشندگی، برای ارتعاشات شبکه‌ای زنجیری از جرمهای یکسان M، که در آن هر یک از جرمها، به وسیلهٔ فنرهایی با ثابت فنر K و K_2، به ترتیب، به اولین و دومین همسایهٔ نزدیک خود وصل شده است، به قرار زیر است :

$$M\omega^2 = 2K\,[1-\cos(ka)] + 2K_2\,[1-\cos(2ka)]$$

که در آن a فاصله ترازمند است.

نشان دهید که؛

(الف) در حد طول موجهای بلند، این رابطهٔ پاشندگی به رابطه مربوط به امواج صوتی تبدیل می‌شود (اطمینان حاصل کنید که سرعت موج صوتی متناظر با سرعتی است که به وسیلهٔ مدول کشسانی بلور پیش بینی می‌شود)،

(ب) سرعت گروه در $k=\pm\pi/a$ صفر می‌شود؛ و

(ج) ω برحسب k با دورهٔ $2\pi/a$ دوره‌ای است.

توضیح دهید چرا انتظار می‌رود که حتی اگر نیروهای وارد از همسایگان دورتر را نیز

منظور کنیم، بندهای (الف)، (ب) و (ج) به قوت خود باقی خواهند ماند.

۲-۲ با در نظر گرفتن زنجیری خطی از جرمهای یکسان M، که به وسیلهٔ فنرهایی با ثابتهای نیروی یک در میان K_1 و K_2 به هم متصل‌اند، می‌توان الگویی برای ارتعاشات کشانندهٔ یک زنجیر پلی اتیلن ‎-CH = CH - CH = CH-‎ ساخت.

نشان دهید که بسامدهای مشخصهٔ چنین زنجیری به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\omega^2 = \frac{K_1 + K_2}{M}\left[1 \pm \left(1 - \frac{4K_1K_2 \sin^2(\frac{1}{2}ka)}{(K_1+K_2)^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right]$$

که در آن a فاصلهٔ تکرار زنجیر است. (توجه کنید که طولهای نسبی پیوندهای یگانه و دوگانه در این رابطه وارد نشده‌اند؛ چرا؟) با به دست آوردن مقادیر ω به ازای $k \to 0$ ، $k \to \pm\pi/a$، منحنیهای پاشندگی را برای شاخه‌های اپتیکی و آکوستیکی طیف ارتعاشی رسم کنید.

۳-۲ عباراتی برای ظرفیت گرمایی ناشی از ارتعاشات طولی زنجیری از اتمهای یکسان به دست آورید،

(الف) در تقریب دبی؛

(ب) با استفاده از چگالی دقیق حالتها [معادلهٔ (۲-۳۳)].

با ثابتهای یکسان K و M، کدام عبارت ظرفیت گرمایی بزرگتری را به دست می‌دهد و چرا؟ نشان دهید که در دماهای پایین هر دو عبارت ظرفیت گرمایی یکسانی، متناسب با T، را نتیجه می‌دهند.

۴-۲ رابطهٔ بین بسامد ν و طول موج λ، برای امواج کشش سطحی روی مایعی با چگالی ρ و کشش سطحی σ عبارت است از

$$\nu^2 = \frac{2\pi\sigma}{\rho\lambda^3}$$

با استفاده از این نتیجه، "نظریهٔ دبی" مربوط به سهم سطح در انرژی داخلی مایع را بسازید. قانونی مشابه قانون T^3 دبی، برای سهم سطح در ظرفیت گرمایی هلیم مایع، در دمای خیلی نزدیک به صفر مطلق، به دست آورید.

با فرض اینکه σ انرژی آزاد سطحی است $(F = U - TS)$، σ چگونه با دما، در مجاورت صفر مطلق، تغییر می‌کند؟

۵-۲ با استفاده از معادلهٔ (۲-۲۶) نشان دهید که در تعادل گرمایی در دمای T، انرژی متوسط مدی با طول موج به قدر کافی بلند برابر $k_B T$ است.

در دماهای به مراتب کمتر از دمای دبی، Θ_D، تقریباً چه تعداد مد برانگیخته خواهند شد؟

از پاسخ خود استفاده کنید و نشان دهید که برای $T << \Theta_D$ ، ظرفیت گرمایی ناشی از ارتعاشات اتمی، برای جامدی شامل N اتم، از مرتبهٔ $Nk_B\,(T/\Theta)^۳$ است.

۲-۶ انرژی نقطهٔ صفر به ازای یک اتم مربوط به ارتعاشات شبکهٔ آرگون جامد ($\Theta_D = ۹۲K$) را تخمین بزنید و آن را با انرژی بستگی به ازای یک اتم آرگون جامد که برابر $۰/۰۹۰eV$ اندازه‌گیری شده است، مقایسه کنید.

۲-۷ مقدار ثابت گرون آیزن γ را برای یک بلور از گاز بی‌اثر تخمین بزنید. از شکل پتانسیل بین اتمی لنارد - جونز استفاده کنید (زیر نویس شکل ۱-۲۳ را ببینید).

۲-۸ با استفاده از داده‌های شکل ۲-۱۹ (ب) :

(الف) قطر میله‌های یاقوت کبود؛ و

(ب) مقدار b که در وابستگی دمایی $exp\,(\Theta_D/bT)$ در مسافت آزاد میانگین فونون، در دماهای‌میانی، ظاهر می‌شود را تخمین بزنید.

برای‌یاقوت‌کبود $\Theta_D = ۱۰۰۰K$، سرعت‌صوت $۱۰^۴ ms^{-۱}$ ودر $T << \Theta$، $= ۱۰^{-۱} T^۳ Jm^{-۳} K^{-۱}$ است.

علم را می‌توان هنر فرا ساده‌سازی سازمان یافته توصیف کرد.
سرکارل کوپر (۱۹۸۲)



الکترون‌های آزاد در فلزات

۳-۱ مقدمه

بسیاری از جامدات الکتریسته را هدایت می‌کنند؛ این معمولاً نشانگر وجود الکترونهایی است که مقید به اتمها نیستند بلکه قادرند در سرتاسر بلور حرکت کنند. جامدات رسانا به دو دستهٔ اصلی تقسیم می‌شوند؛ فلزات و نیمرساناها. مقاومت ویژهٔ فلزات در دمای اتاق نوعاً در گسترهٔ 10^{-6} تا $10^{-8}\Omega m$ است و معمولاً با افزایش مقادیر کمی ناخالصی **افزایش** می‌یابد؛ این مقاومت ویژه با کاهش دما معمولاً به طور یکنواختی کاهش می‌یابد. مقاومت ویژهٔ نیمرساناهای خالص در دمای اتاق بسیار بیش از فلزات است ولی افزودن مقادیر کمی ناخالصی می‌تواند چندین مرتبهٔ بزرگی از این مقاومت ویژه **کاسته** و آن را به مقاومت ویژهٔ فلزات نزدیک کند؛ مقاومت ویژهٔ نیمرساناها همیشه با دما به طور یکنواخت تغییر نمی‌کند اما نیمرساناها در پایین‌ترین دماها عایق می‌شوند.

این سئوال را که چرا الکترونهای متحرک در بعضی جامدات ظاهر می‌شوند و در بعضی دیگر نه تا فصل بعد به کنار می‌گذاریم؛ این سئوال بسیار مشکلی است، به ویژه اگر برهم‌کنشهای بین الکترونها نیز منظور شوند. در این فصل خواص فلزات را با به کار بردن فرض وجود الکترونهای رسانشی و شمول تمامی الکترونهای ظرفیتی همهٔ اتم‌ها، محاسبه خواهیم کرد؛ لذا فرض خواهد شد که سدیم، منیزیم و آلومینیوم فلزی به ترتیب یک، دو و سه الکترون متحرک به ازای هر اتم داشته باشند. ما نظریهٔ سادهٔ مدل الکترون آزاد را توصیف خواهیم کرد که در توضیح خواص خیلی از فلزات بسیار کار آمد است. نیمرساناها موضوع فصل ۵ هستند.

۳-۲ مدل الکترون آزاد

ساده‌ترین رهیافت ممکن آن است که فرض شود الکترونها در فلز نظیر گازی از ذرت آزاد رفتار می‌کنند؛ این **مدل الکترون آزاد** است. جدا کردن الکترونهای رسانشی از یک اتم، **مغزیونی** را با بار مثبت به جای می‌گذارد. مدل الکترون آزاد فرض می‌کند که چگالی بار وابسته به مغزهای یونی به طور یکنواخت در سرتاسر فلز توزیع شده است، گونه‌ای که الکترونها در یک پتانسیل الکتروستاتیکی ثابت حرکت می‌کند. توجه کنید که با اعمال این فرض تمام جزئیات ساختار بلوری نادیده گرفته می‌شود. در فصل بعد اثر به کارگیری یک پتانسیل واقعی‌تر را برای مغزهای یونی مثبت بررسی می‌کنیم. مدل الکترون آزاد برهم کنش دافعهٔ بین الکترونهای رسانشی را نیز نادیده می‌گیرد. بنابراین، این مدل، الکترونها را به صورتی در نظر می‌گیرد که مستقل از یکدیگر در یک چاه پتانسیل مربعی با عمق متناهی حرکت می‌کنند: لبه‌های چاه، متناظر با مرزهای فلز است.

از آن جا که خواص حجمی یک قطعهٔ ماکروسکوپی فلز، نظیر ظرفیت گرمایی ویژه، مستقل از شکل فلز است، برای سادگی، مکعبی از فلز به یال L با وجوهی عمود بر محورهای x، y، z در نظر می‌گیریم. باید معادلهٔ مستقل از زمان شرودینگر

$$-\frac{\hbar^{۲}}{۲m}\nabla^{۲}\psi=\varepsilon\,\psi \qquad (۳-۱)$$

را برای توابع موج ψ و انرژی‌های ε الکترونهای درون مکعب حل کنیم؛ پتانسیل یکنواخت درون مکعب را صفر در نظر می‌گیریم. توابع موج، به شرط مرزی بر روی وجوه مکعب بستگی دارند. یک امکان آن است که شرط $\psi=۰$ بر روی وجوه را به کار بریم، که به امواج ساکن به عنوان جوابهای معادلهٔ شرودینگر در درون فلز منجر می‌شود. گرچه این شرط مرزی، شرط مرزی دقیقاً مناسبی در یک ناپیوستگی متناهی پتانسیل نیست، ولی توابع موج در گسترهٔ حدود یک فاصلهٔ اتمی از سطح، به صفر می‌رسند (مسئله ۳-۱ را ببینید)، و چون این فاصله بسیار کمتر از L است، خطای ناشی از به کار بردن آن قابل اغماض است. از نظر تجربی خواص حجمی فلزات به شرایط وجوه بستگی ندارند و در نتیجه خواص محاسبه شده نباید به شرط مرزی فرض شده وابسته باشند. این ویژگی به کاربردن شرط مرزی دوره‌ای را جذاب می‌کند، چون در این صورت توابع موج الکترونی امواج متحرک هستند. این رهیافت در بحث امواج ارتعاشی شبکه در فصل ۲ (معادلهٔ (۲-۳۹)) به کار گرفته شد و در اینجا هم علی‌الاصول همان پیامدهای آن جا را داراست.

لذا با اعمال شرط مرزی دوره‌ای به شکل

$$\psi(x+L,y+L,z+L)=\psi(x,y,z) \qquad (۳-۲)$$

در می‌یابیم که جوابهای معادلهٔ شرودینگر امواج تختی به قرار زیر هستند

$$\psi(x,y,z)=\frac{1}{V^{1/2}}\ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}=\frac{1}{V^{1/2}}=e^{i\,(k_x\,x\,+k_y\,y\,+k_z\,z)} \tag{۳-۳}$$

که در آن $V=L^3$ حجم مکعب است، و ضریب $\frac{1}{V^{1/2}}$ تضمین می‌کند که تابع موج بهنجار است. مؤلفه‌های بردار موج باید در روابط زیر صدق کنند

$$k_x=\frac{2\pi p}{L}\ ,\qquad k_y=\frac{2\pi q}{L}\ ,\qquad k_z=\frac{2\pi r}{L} \tag{۴-۳}$$

که در آن p، q و r همهٔ مقادیر عدد صحیح اعم از مثبت، منفی یا صفر را به خود می‌گیرند (معادلهٔ (۲-۴۰) را ببینید). تابع موج (۳-۳) متناظر است با انرژی

$$\varepsilon=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}\ (k_x^2+k_y^2+k_z^2) \tag{۵-۳}$$

و اندازه حرکت

$$\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}=\hbar\ (\mathbf{k_x}\,,\,\mathbf{k_y}\,,\mathbf{k_z}\ ) \tag{۶-۳}$$

از بخش ۲-۶-۲ می‌دانیم که تعداد مقادیر مجاز $\mathbf{k}$ درون پوسته‌ای کروی در فضای $\mathbf{k}$ به شعاع k و ضخامت dk و به مرکز مبداء (شکل ۲-۱۳ را ببینید)، از معادلهٔ (۲-۳۸) به قرار زیر به دست می‌آید.

$$g(k)\,dk=\frac{Vk^2}{2\pi^2}\ dk$$

که در آن $g(k)$ چگالی حالتها به ازای واحد بزرگی k است. این نتایج را می‌توانیم برای محاسبهٔ تعداد حالتهای مجاز الکترونی در واحد گسترهٔ انرژی، $g(\varepsilon)$، به کار بریم. برای این منظور باید این حقیقت را به حساب آوریم که الکترونها اسپین $\frac{1}{2}$ دارند. بنابراین هر حالت $\vec{k}$ دو حالت الکترونی مُمکن را نمایش می‌دهد، یکی برای هر یک از دو قطبیدگی اسپینی ممکن. این حالتها در غیاب میدان مغناطیسی اعمالی، انرژی یکسانی دارند. بنابراین تعداد حالتهای الکترونی در پوستهٔ کروی بین k و $k+dk$ را، که متناظر با گسترهٔ انرژی بین ε و $\varepsilon+d\varepsilon$ است، می‌توان چنین نوشت.

$$g(\varepsilon)\,d\varepsilon=2g(k)\,dk$$

یعنی

$$g(\varepsilon)=2g(k)\frac{dk}{d\varepsilon}$$

از این رو؛ با به کار بردن معادلات (۳-۵) و (۲-۳۸) داریم

$$g(\varepsilon) = \left(2\frac{V}{2\pi^2}\right) k \left(k\frac{dk}{d\varepsilon}\right)$$

$$= \left(\frac{V}{\pi^2}\right)\left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2}\left(\frac{m}{\hbar^2}\right)$$

$$= \frac{V}{2\pi^2\hbar^3}(2m)^{3/2}\varepsilon^{1/2} \tag{۳-۷}$$

۳-۲-۱ حالت زمینهٔ گاز الکترون آزاد

الکترونها به دلیل آنکه اسپین نیمه صحیح دارند فرمیون هستند و باید از اصل طرد پاولی پیروی کنند؛ بنابراین هر حالت تنها می‌تواند حاوی یک الکترون باشد. لذا کم انرژی‌ترین حالت مربوط به N الکترون آزاد با پرکردن N حالت با کم‌ترین انرژی حاصل می‌شود. بنابراین تمامی حالتها تا انرژی ε_F که **انرژی فرمی** نام دارد پر هستند، ε_F با به کار بردن این شرط که تعداد حالتهای با $\varepsilon<\varepsilon_F$ که توسط انتگرال‌گیری از چگالی حالتها (معادلهٔ ۳-۷) از ۰ تا ε_F به دست می‌آید باید مساوی N باشد تعیین می‌شود. از این رو

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon)\,d\varepsilon = \frac{V}{3\pi^2\hbar^3}(2m\varepsilon_F)^{3/2} \quad \left[= \frac{2}{3}\varepsilon_F\, g(\varepsilon_F)\right] \tag{۳-۸}$$

به گونه‌ای که

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{2/3} \tag{۳-۹}$$

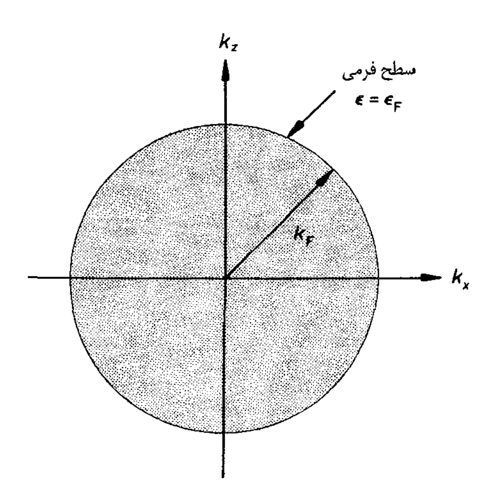
حالتهای اشغال شده آنهایی هستند که درون کرهٔ فرمی در فضای k مطابق شکل ۳-۱ واقع شده‌اند؛ سطح این کره سطح فرمی، و شعاع آن **عدد موج فرمی** k_F است. k_F از معادلهٔ (۳-۵)، توسط $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ به دست می‌آید، در نتیجه

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{1/3} \tag{۳-۱۰}$$

از چگالی حالتهای موج متحرک در فضای $\mathbf{k}$ طبق معادلهٔ (۲-۴۱) با محاسبهٔ شعاع کره‌ای که حاوی $\mathbf{k}$ $\left(\frac{N}{2}\right)$ حالت است k_F را می‌توان به سادگی محاسبه کرد؛ به این ترتیب

$$\frac{4}{3}\pi k_F^3 \rho_R(k) = \frac{4}{3}\pi k_F^3 \frac{V}{8\pi^3} = \frac{N}{2}$$

که به معادله (۳-۱۰) منجر می‌شود.



شکل ۳-۱: مقطع کرهٔ فرمی در فضای k. سطح فرمی سطح کره است و مرز بین حالتهای اشغال شده (سایه‌دار) و اشغال نشده را در دمای صفر مطلق برای گاز الکترون آزاد مشخص می‌کند.

مقادیر نوعی را می‌توان با به کار بردن فلز پتاسیم تک ظرفیتی به عنوان مثال تعیین کرد: چگالی اتمی پتاسیم و در نتیجه چگالی الکترونهای ظرفیتی، $\frac{N}{V}$، برابر است با $۱/۴۰۲ \times ۱۰^{۲۸}\, m^{-۳}$ ، به گونه‌ای که

$$\varepsilon_F = ۳/۴۰ \times ۱۰^{-۱۹} J = ۲/۱۲\ eV \qquad (۱۱\text{-}۳)$$

$$k_F = ۰/۷۴۶ \quad \text{Å}^{-۱} \qquad (۱۲\text{-}۳)$$

بنابراین ε_F از مرتبهٔ انرژیهای یونش اتمی و k_F از مرتبهٔ وارون فاصلهٔ بین اتمها است. آموزنده است که **دمای فرمی** یا **دمای تبهگنی** T_F با رابطهٔ $\varepsilon_F = k_B\, T_F$ تعریف شود؛ برای پتاسیم

$$T_F = ۲/۴۶ \times ۱۰^{۴} K \qquad (۱۳\text{-}۳)$$

اهمیت T_F در آن است که تنها در دمایی از این مرتبه است که ذرات یک گاز کلاسیکی انرژی جنبشی به بزرگی ε_F می‌یابند؛ و تنها در دماهای بالاتر از T_F است که گاز الکترون آزاد نظیر یک گاز کلاسیکی رفتار می‌کند. فلزات در عمل قبل از رسیدن به دمای T_F تبخیر می‌شوند. در دماهای معمولی که $T << T_F$ اصل طرد پاولی بر رفتار گاز الکترون آزاد حاکم است و گاز را در این حالت شدیداً بتهگن می‌گویند. انرژی جنبشی بزرگ الکترونها سهم قابل توجهی در مدول حجمی بیشتر فلزات دارد (مسئله ۳-۳ را ببینید). دو پارامتر دیگری که ما به کار خواهیم برد عبارتند از **اندازه حرکت فرمی** $p_F (= \hbar k_F)$ **و سرعت فرمی** $v_F \left(= \frac{p_F}{m} \right)$؛ این دو به ترتیب برابرند با اندازه حرکت و سرعت الکترونها در حالتهای روی سطح فرمی. برای پتاسیم $v_F = ۰/۸۶ \times ۱۰^{۶} ms^{-۱}$. همان گونه که خواننده احتمالاً از به کار بردن این همه پارامتر با

برچسب فرمی حدس زده است، سطح فرمی نقش مهمی در رفتار فلزات دارد.

۳-۲-۲ گاز الکترون آزاد در دمای محدود

در دمای T ، احتمال اشغال یک حالت الکترونی با انرژی ε با تابع توزیع فرمی داده می‌شود.

$$f(\varepsilon,T)=\frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T}+1} \qquad (۱۴-۳)$$

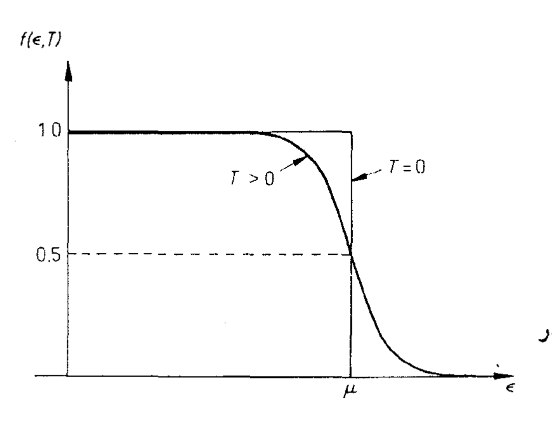
که در آن μ پتانسیل شیمیایی است (فصل ۱۱ کتاب مندل [۲]). این تابع در شکل ۳-۲ (الف) در صفر مطلق و در دمای متناهی رسم شده است. $f(\varepsilon)$ در صفر مطلق یک تابع پله‌ای است: $f(\varepsilon)=1$ برای $\varepsilon<\mu$ و $f(\varepsilon)=0$ برای $\varepsilon>\mu$. بنابراین $\varepsilon=\mu$ مرز بین حالتهای اشغال شده و حالتهای اشغال نشده را مشخص می‌کند و، از مبحث بخش قبل، می‌بینیم که در $T=0$ ، μ مساوی ε_f است. پیامد بزرگ بودن دمای تبهگنی در گاز الکترون آزاد آن است که تعداد بسیار کمی از الکترونها برانگیختهٔ گرمایی می‌شوند؛ تعداد الکترونها در واحد گسترهٔ انرژی در تعادل گرمایی با ضرب کردن تابع چگالی حالتها، $g(\varepsilon)$ ، در احتمال اشغال هر حالت، $f(\varepsilon,T)$ ، به دست می‌آید.

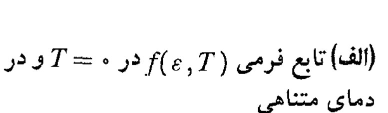
$$n(\varepsilon,T)=g(\varepsilon)f(\varepsilon,T) \qquad (۱۵-۳)$$

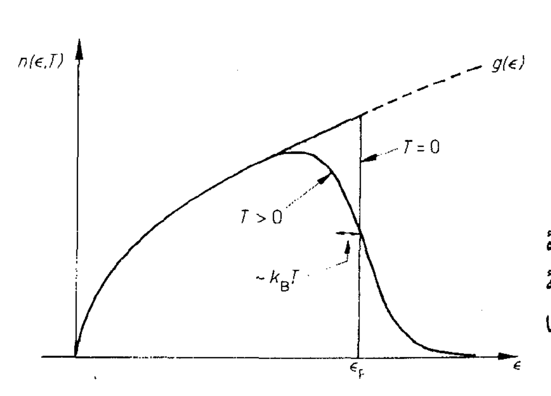
این تابع در شکل ۳-۲ (ب) به ازای $T=0$ و برای یک دمای متناهی $T<<T_f$ رسم شده است. تعداد الکترونها در هر گسترهٔ انرژی درست برابر مساحت زیر نمودار $n(\varepsilon,T)$ در آن گستره است. در دماهای متناهی تابع توزیع فرمی (شکل ۳-۲ (الف)) در گسترهٔ دمایی از مرتبه $k_B\ T$ حول $\varepsilon=\mu$ از مقدار ۱ به صفر کاهش می‌یابد. بنابراین اثر دماهای متناهی آن است که تعداد اندکی از الکترونها از ناحیهٔ سایه‌دار با $\varepsilon<\varepsilon_f$ ، در شکل ۳-۲ (ب) به ناحیهٔ سایه‌دار با $\varepsilon>\varepsilon_f$ منتقل می‌شوند.

۳-۲-۳ ظرفیت گرمایی گاز الکترون آزاد

می‌توانیم با استفاده از شکل ۳-۲ (ب) تخمینی از انرژی گرمایی و در نتیجه ظرفیت گرمایی الکترونها به دست آوریم. اگر ناحیهٔ سایه‌دار را به تقریب مثلثی با ارتفاع $\frac{1}{2}g(\varepsilon_f)$ و قاعدهٔ $2k_B\ T$ بگیریم، آنگاه از شکل ۳-۲ (ب) نتیجه می‌شود که تقریباً تعداد $\frac{1}{2}g(\varepsilon_f)k_B\ T$ الکترون انرژی خود را حدود $k_B\ T$ افزایش داده‌اند. به گونه‌ای که انرژی گرمایی آنها (اختلاف در




(الف) تابع فرمی $f(\varepsilon, T)$ در $T = \circ$ و در دمای متناهی



(ب) تعداد الکترونها در واحد گسترهٔ انرژی مطابق مدل الکترون آزاد. ناحیهٔ سایه‌دار تغییر توزیع از صفر مطلق تا دمای متناهی را نشان می‌دهد.

شکل ۳-۲

انرژی داخلی از مقدار آن در $T = \circ$) به قرار زیر است

$$E(T) - E(\circ) \sim \frac{۱}{۲} g(\varepsilon_f)(k_B T)^{۲}$$

مشتق‌گیری نسبت به T ظرفیت گرمایی در حجم ثابت را می‌دهد،

$$C_v \sim g(\varepsilon_f) k_B^{۲} T = \frac{۳}{۲} \left(\frac{N}{\varepsilon_f}\right) k_B^{۲} T = \frac{۳}{۲} N k_B \left(\frac{T}{T_f}\right) \quad \text{(۱۶-۳)}$$

که در آن عبارت داخل کروشه در معادله (۳-۸) را به کار گرفته‌ایم.

برای به دست آوردن جواب دقیق لازم است **اولاً** پتانسیل شیمیایی در دمای T با استفاده از تعمیم معادلهٔ (۳-۸) در $T \neq \circ$ محاسبه شود، یعنی

$$N=\int_{0}^{\infty} n(\varepsilon, t)\, d\varepsilon \qquad (۱۷-۳)$$

(μ تنها مجهول این معادله است) و **ثانیاً** انرژی به صورت زیر محاسبه شود.

$$E(T)=\int_{0}^{\infty} \varepsilon n(\varepsilon, T)\, d\varepsilon \qquad (۱۸-۳)$$

این محاسبه، روند ریاضی نسبتاً پیچیده‌ای است؛ برای $T << T_f$ ، μ با افزایش T بسیار آرام از مقدار ε_f کاهش می‌یابد (در بیشتر موارد می‌توان از وابستگی به T صرفنظر کرد) و C_V با رابطهٔ زیر داده می‌شود

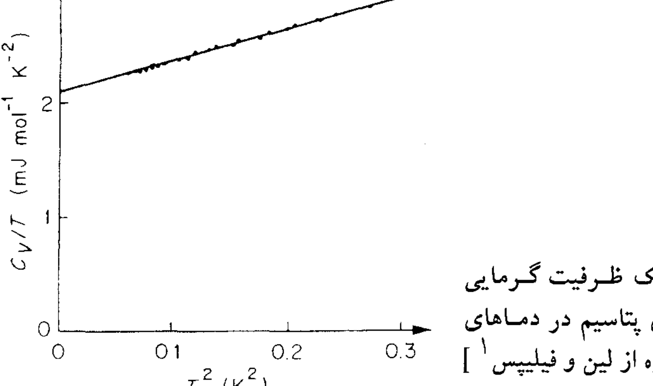
$$C_V=\frac{\pi^2}{3} g(\varepsilon_F)\, k_B^2\, T=\frac{\pi^2}{2} N k_B \left(\frac{T}{T_F}\right) \qquad (۱۹-۳)$$

این مقدار، به جز ضریب عددی آن، با تخمین ما در رابطهٔ (۳-۱۶) یکسان است.

نظریهٔ الکترون آزاد اولین بار قبل از نظریهٔ کوانتومی ارائه شد، و یکی از مسائلی که با آن روبه رو شد آن بود که ظرفیت گرمایی الکترونها طبق نظریهٔ کلاسیکی همپاری $\frac{3}{2} N k_B$ می‌شد، که در تجربه مشاهده نشد؛ از معادلهٔ (۳-۱۹) می‌بینیم که نظریهٔ کوانتومی، این مسئله را با کاهش ظرفیت گرمایی مورد انتظار با ضریبی از مرتبهٔ T/T_F حل کرد. ظرفیت گرمایی **شبکه‌ای** بیشتر فلزات در دمای اتاق نزدیک به مقدار کلاسیکی همپاری آن است ($3N k_B$ برای فلزات یک ظرفیتی مطابق معادلهٔ (۲-۴۳)) و لذا سهم الکترونی را کاملاً تحت الشعاع قرار می‌دهد. ولی در دماهای پایین در مقایسه با دمای دبی Θ_D، سهم شبکه سریعاً با بستگی T^3 طبق معادلهٔ (۲-۵۴) کاهش می‌یابد و سهم الکترونی مهم می‌شود. بنابراین ظرفیت گرمایی کل در دماهای پایین به قرار زیر است

$$C_V=\gamma T+\beta T^3 \qquad (۲۰-۳)$$

ثابتهای γ و β را می‌توان با رسم $\frac{C_V}{T}$ به صورت تابعی از T^2 تعیین کرد؛ این کار برای پتاسیم در شکل ۳-۳ انجام شده است. می‌بینیم که دو سهم، در دماهای حدود $1k$ قابل مقایسه‌اند. توجه کنید که ظرفیت گرمایی پتاسیم کلرید نیز به همین روش در شکل ۲-۱۴ رسم شده است و همان گونه که انتظار می‌رود، سهم الکترونی در این ماده وجود ندارد. مقدار ثابت **گرمای ویژهٔ الکترونی** γ برای پتاسیم از روی عرض از مبداء در شکل ۳-۳ برابر $2/08 mJ\ mol^{-1} K^{-2}$ به‌دست می‌آید؛ مقدار پیش‌بینی شده، با به‌کارگیری معادلهٔ (۳-۱۹) و بااستفاده از مقدار T_F برای پتاسیم طبق معادلهٔ(۳-۱۳)، برابر $1/67 mJ\ mol^{-1} K^{-2}$ به دست می‌آید. این تفاوت ۲۵٪ با توجه به راهکار ساده‌ای که در مدل الکترون آزاد به کار گرفته شده غیرمنتظره نیست.



شکل ۳-۳ تفکیک ظرفیت گرمایی الکترونی و شبکه‌ای پتاسیم در دماهای پایین [با کسب اجازه از لین و فیلیپس[1]]

منشأ این اختلاف غالباً چنین تعبیر می‌شود که الکترونها دارای **جرم مؤثر** m^* هستند که با جرم **واقعی** آنها تفاوت دارد. با نشاندن m^* به جای m در معادلات (۳-۱) و (۳-۵) و تکرار محاسبات، در می‌یابیم که ε_F ، T_F و v_F با یک ضریب $\frac{m}{m^*}$ از مقادیر متناظر الکترون آزاد متفاوتند؛ حال آن که $g(\varepsilon_F)$ و در نتیجه C_V با ضریب $\frac{m^*}{m}$ تغییر می‌کنند؛ p_F و k_F تغییر نمی‌کنند (مقادیر مجاز **k** تماماً بی‌تغییر می‌مانند). بنابراین برای پتاسیم $\frac{m^*}{m} = ۱/۲۵$ ؛ مقادیر نظیر برای منیزیم و آلومینیم عبارتند از ۱/۳ و ۱/۴۸ ، که نشان می‌دهد اصلاح ناشی از جرم مؤثر در تمامی فلزات از همین مرتبه است (توجه کنید که برای بعضی فلزات، نظیر روی و کادمیم، $\frac{m^*}{m} < ۱$).

در محاسبهٔ نظری m^* باید توزیع صحیح چگالی بار مثبت درون بلور را در نظر گرفت و برهم کنش‌های الکترون- الکترون را نیز منظور کرد. توزیع بار مثبت به دو روش متمایز بر m^* اثر می‌گذارد: پتانسیل دوره‌ای وابسته به مغزهای یونی ساکن مستقر در جایگاههای بلور خود باعث تغییری می‌شود که در فصل بعد بیشتر مورد بحث قرار گیرد؛ علاوه بر آن حرکت یک الکترون موجب حرکت مغزهای یونی مجاور آن می‌شود و این **برهم کنش الکترون- فونون** نیز در جرم مؤثر سهم دارد (اثر برتر در فلزات قلیایی، احتمالاً همین اثر است). اگر الکترونهای رسانشی را به صورت شاره‌ای در نظر بگیریم، چگونگی تغییر جرم مؤثر، در اثر برهم‌کنش الکترون- الکترون آشکار می‌شود. دافعهٔ وارد بر شاره از سوی الکترون متحرک در درون آن باعث می‌شود که شاره با تغییر مسیر خود از سر راه الکترون دور شود. این **پس زدگی** شاره از اطراف الکترون متحرک، مشابه رفتار شارهٔ واقعی حول یک جسم جامد متحرک درون آن است، که نظریهٔ

۱- *W.H. Lien and N.E. Phillips, Phys. Rev. 133, A 1370 (1964)*

هیدرودینامیکی در مورد آن یک جرم لختی مؤثر بزرگتر از جرم واقعی برای جسم متحرک پیش‌بینی می‌کند **(جرم مجازی هیدرودینامیکی)**.

یک مشکل مفهوم جرم مؤثر آن است که جرمهای مؤثر متفاوتی برای توضیح انحراف خواص مختلف الکترونهای رسانشی در یک فلز خاص از مقادیر مربوط به الکترون آزاد آن، لازم است. در بخش ۴-۴ این واقعیت را به طور جامع نشان خواهیم داد. در هر حال جرم مؤثر وابسته به هر خاصیت، روش مفیدی برای کمی کردن انحراف آن خاصیت از مقداری که الکترون آزاد پیش‌گویی می‌کند فراهم می‌آورد و مفهومی است که مکرراً آن را به کار خواهیم برد.

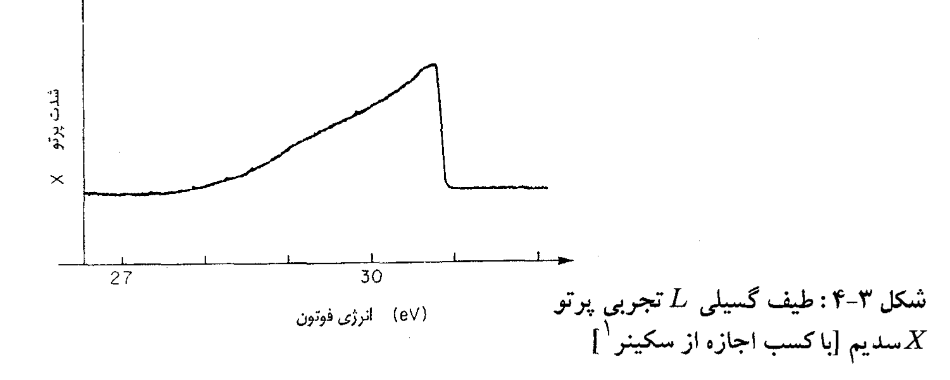
۳-۲-۴ طیف گسیلی پرتو X نرم

ظرفیت گرمایی الکترونی فلزات، تنها به خواص الکترونهای با انرژیهای نزدیک به انرژی فرمی بستگی دارد. طیف گسیلی پرتو X روشی برای مطالعهٔ الکترونهای رسانشی با هر مقدار انرژی فراهم می‌آورد. این طیف، با تاباندن الکترونهای پرانرژی از یک چشمهٔ خارجی و کندن الکترونها از پوسته‌های K و L مغزهای یونی حاصل می‌شود؛ الکترونهای رسانشی به درون حالتهای خالی می‌افتند و پرتوهای X نرم گسیل می‌شوند. گسترهٔ انرژی این پرتوهای X باید گسترهٔ انرژی الکترونهای رسانشی را مشخص کند؛ انتظار داریم که این طیف، شکلی تقریباً شبیه به منحنی $n(\varepsilon\ ,\ T)$ در شکل ۳-۲ (ب) داشته باشد، این دو دقیقاً یکسان نخواهند بود، زیرا این طیف، علاوه بر وابستگی به $n(\varepsilon, T)$ به یک احتمال گذار وابسته به انرژی نیز بستگی دارد. وارسی طیف پرتو X گسیلی سدیم در شکل ۳-۴ این نکته را تأیید می‌کند.

نکتهٔ قابل توجه ویژه در شکل ۳-۴، قطع تیز طیف به دلیل کاهش تیز $n(\varepsilon\ ,\ T)$ در سطح فرمی است. تیزی قطع، با پهنای ناحیهٔ گرد شدن توزیع فرمی در دمای اتاق، یعنی $k_B T$ سازگار است، و می‌توانیم نتیجهٔ بسیار مهمی از آن استنتاج کنیم. این می‌رساند که انرژی الکترونهای رسانشی در مقیاسی از مرتبهٔ $k_B T$ به خوبی تعریف شده‌اند، از همین روست که می‌توانیم، با استفاده از رابطهٔ عدم قطعیت انرژی- زمان حد پایین طول عمر τ یک حالت الکترون رسانشی در مجاورت سطح فرمی را مشخص کنیم. عدم قطعیت در انرژی این حالت را با $\Delta\varepsilon$ نمایش می‌دهیم، داریم $\Delta\varepsilon < k_B T$ در نتیجه

$$\tau \sim \frac{\hbar}{\Delta\varepsilon} > \frac{h}{k_B T} = ۲\times ۱۰^{-۱۴}\ s.$$

این زمانی طولانی است، زمانی کافی برای یک الکترون در حالتی بر روی سطح فرمی که حدوداً



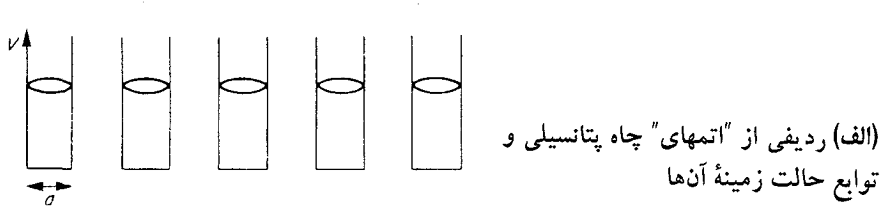
شکل ۳-۴ : طیف گسیلی L تجربی پرتو X سدیم [با کسب اجازه از سکینر[1]]

۱۰۰ برابر فاصلهٔ بین اتمها را بپیماید. یک عامل محدود کنندهٔ طول عمر حالتهای الکترونی، برهم کنش الکترون-الکترون است، ولی شواهد ناشی از شکل ۳-۴ گواه برآنند که آثار ناشی از این برهم کنش آن قدر قوی نیستند که مانع آن شوند که یک مدل ذرهٔ مستقل (نظیر مدل الکترون آزاد) تقریب خوبی باشد. گرچه تعیین دقیق آستانهٔ گسیل پرتو X، در انتهای کم انرژی طیف مشکل است، ولی شکل ۳-۴ انرژی الکترونهای رسانشی را در گستره‌ای بزرگتر یا مساوی ۲/۵eV تعیین می‌کنند. این مقدار با ε_F برای سدیم در مدل الکترون آزاد، ۳/۲۳ eV ، قابل مقایسه است.

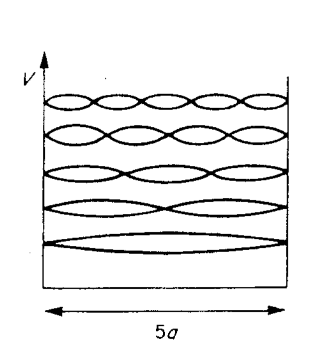
۳-۲-۵ پیوند فلزی

کاهش انرژی جنبشی مربوط به غیر جایگزیده شدن الکترونهای رسانشی، در انرژی بستگی فلزات سهیم است. برای نمایش این موضوع الکترون آزاد فلز یک بعدی شکل ۳-۵ (ب) را در نظر می‌گیریم که با گردآوری "اتمهای" بسیار ویژه (وغیرواقعی) که در شکل ۳-۵ (الف) نشان داده شده‌اند ساخته شده است. هر اتم حاوی یک الکترون در یک چاه پتانسیل نامتناهی مربعی با پهنای aاست؛ انرژی حالت زمینهٔ الکترون در چنین اتمی برابر $\frac{\hbar^2}{8ma^2}$ است (در مقایسه با ته چاه). پنج تابع موج با پایین‌ترین انرژی در فلز الکترون آزاد یک بعدی به طول ۵a متشکل از پنج تا از این اتمها در شکل ۳-۵ (ب) نشان داده شده است، می‌توانیم ببینیم که **بالاترین** آنها دارای همان طول موج (و در نتیجه همان انرژی) حالت زمینهٔ یک تک "اتم" است. بنابراین انرژی میانگین پنج الکترون با تشکیل بلور، حتی بدون در نظر گرفتن اسپین الکترون، (که در نتیجهٔ آن حضور دو الکترون در هر تراز انرژی مجاز می‌شود) کاهش می‌یابد. این پدیدهٔ مکانیک

۱-*H.W.B. Skinner, Phil. Trans. R.Soc. 239. 95 (1990)*



(الف) ردیفی از "اتمهای" چاه پتانسیلی و توابع حالت زمینهٔ آن‌ها



(ب) پنج تابع موج با پایین‌ترین انرژی برای همان ردیف از اتمها که به صورت بلور در آمده باشد.

شکل ۳-۵

کوانتومی، یعنی کاهش انرژی جنبشی توسط غیر جایگزیده شدن الکترونها، سهم مهمی در پیوند فلزی دارد، هر چند در یک فلز واقعی، تغییر در انرژی پتانسیل الکتروستاتیکی الکترونها و یونها نیز از اهمیتی در همین مقیاس برخوردار است.

۳-۳ خواص ترابردی الکترون‌های رسانشی

احتمال اشغال حالتهای الکترونی در حضور میدان الکتریکی و یا گرادیان دما، دیگر از تابع توزیع فرمی، معادلهٔ (۳-۱۴)، به دست نمی‌آید؛ بلکه توزیع به گونه‌ای است که به ترتیب به **ترابرد** بار الکتریکی و ترابرد گرما منجر می‌شود. ضرایب ترابردی که این شارشها را توصیف می‌کنند رسانندگی الکتریکی و گرمایی‌اند، که ما در ادامه به محاسبهٔ آن‌ها خواهیم پرداخت.

۳-۳-۱ معادلهٔ حرکت الکترونها

در غیاب برخوردها، الکترونها از معادلهٔ شتابی زیر پیروی می‌کنند.

$$m_e \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e\mathbf{E} - e\mathbf{v} \times \mathbf{B} \qquad (۳\text{-}۲۱)$$

که در آن $\mathbf{v}$ سرعت الکترون، $\mathbf{E}$ میدان الکتریکی و $\mathbf{B}$ میدان مغناطیسی است. این همان قانون نیوتن برای ذرات به جرم m_e و بار $-e$ است. ما از یک جرم مؤثر m_e استفاده می‌کنیم، با این

اعتقاد که با چنین کاری بعضی از عواملی را که در مدل الکترون آزاد به حساب نمی‌آیند منظور خواهیم کرد؛ در بخش ۴-۴ نشان می‌دهیم که این کار برای مثال برهم کنش الکترونها با پتانسیل دوره‌ای ناشی از مغزهای یونی ساکن را به حساب می‌آورد. علاوه بر این در بخش ۴-۴ توضیح می‌دهیم که چرا جرم مؤثر m_e که در معادلهٔ (۳-۲۱) ظاهر می‌شود با جرم مؤثر ظرفیت گرمایی m^* که در بخش ۳-۲-۳ مطرح شد متفاوت است.

استفاده از معادلهٔ حرکت کلاسیکی یک ذره، برای توصیف رفتار الکترونها در حالتهای موج تخت (معادلهٔ (۳-۳))، که در سرتاسر بلور گسترده‌اند، نیاز به توجیه دارد. با برهم نهش حالتهای موج تخت جهت تشکیل یک بسته موج، می‌توان یک موجود ذره مانند به دست آورد؛ می‌توان نشان داد که معادلهٔ (۳-۲۱) معادلهٔ حرکت این بسته موج است. سرعت بسته موج، سرعت گروه این امواج است. بنابراین

$$\mathbf{v} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon}{d\mathbf{k}} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m_e} = \frac{\mathbf{p}}{m_e}$$

که در آن معادلهٔ (۳-۵) را همراه با تعویض m با m_e به کار برده‌ایم؛ معادلهٔ (۳-۲۲)، رابطهٔ معمولی بین سرعت و اندازه حرکت $\mathbf{p}$ را برای ذره‌ای به جرم m_e بیان می‌کند.

بسته موج ما، برای آنکه نظیر یک ذرهٔ کلاسیکی رفتار کند، باید مکان و اندازه حرکتی نسبتاً خوش تعریف داشته باشد. برای به دست آوردن بسته موجی که در مکانی حدود ۱۰ برابر فاصلهٔ اتمی جایگزیده باشد، نیاز به استفاده از گستره‌ای از عدد موج، از مرتبهٔ $\frac{k_F}{10}$ در برهم نهش امواج تخت داریم؛ این نتیجه از آن جا ناشی می‌شود که k_F از مرتبهٔ معکوس یک فاصلهٔ اتمی است. بنابراین، عدم قطعیت در اندازه حرکت چنین بسته موجی از مرتبهٔ $\frac{p_F}{10}$ است. برای آن که معادلهٔ (۳-۲۱) معتبر باشد، باید انتظار داشته باشیم که بسته موج از هر دو مقیاس طولی مربوط به تغییرات $\mathbf{E}$ و $\mathbf{B}$ (طول موج، اگر امواج الکترومغناطیسی را در نظر داریم) و مسافت آزاد میانگین بین برخورد الکترونها کوچکتر باشد. حد پایین برای اندازهٔ بسته موج از آن جا ناشی می‌شود که این طول باید بسیار بزرگتر از فاصلهٔ اتمی باشد تا برهم کنش الکترون با مغزهای یونی بتواند با یک جرم مؤثر توصیف شود.

در غیاب میدان مغناطیسی اعمالی، معادلهٔ (۳-۲۱) پیش‌بینی می‌کند که میدان الکتریکی dc به شتاب ثابتی برای الکترونها منجر می‌شود، و این جریان الکتریکی‌ای می‌دهد که به طور مانا رو به افزایش است. این پدیده در عمل روی نمی‌دهد ، زیرا الکترونها با ارتعاشات گرمایی مغزهای یونی[1] و با ناکاملی‌های درون بلور نظیر اتمهای ناخالصی برخورد می‌کنند. با تعدیل معادلهٔ (۳-۲۱) به صورت زیر برخوردها را نیز منظور می‌کنیم

۱- اثر مغزهای یونی ساکن را می‌توان تماماً در جرم مؤثر منظور کرد (بخش ۴-۴)

$$m_e \left(\frac{d\mathbf{v}}{dt} + \frac{\mathbf{v}}{\tau}\right) = -e\mathbf{E} - e\mathbf{v} \times \mathbf{B} \qquad (۲۳-۳)$$

جملهٔ اضافی باعث می‌شود که $\mathbf{v}$، با حذف میدانهای اعمالی، به طور نمایی با ثابت زمانی τ به سمت صفر کاهش یابد؛ بنابراین $\mathbf{v}$ در معادلهٔ (۳-۲۳) را باید به عنوان **سرعت رانشی** الکترونها تعبیر کرد، یعنی سرعت اضافی‌ای که به فاصله گرفتن از حالت تعادل گرمایی، حاصل از تابع توزیع فرمی، مربوط می‌شود. بنابراین معادلهٔ (۳-۲۳) بیان می‌دارد که اگر میدانها حذف شوند، توزیع الکترونی به توزیع فرمی وامی هلد. اگر فرض کنیم که الکترون در هر برخورد تمامی سرعت را نشی خود را از دست می‌دهد، آنگاه τ زمان متوسط بین برخوردهاست؛ در هر صورت τ کمیتی با مرتبهٔ بزرگی زمان متوسط بین برخوردهاست.

۳-۳-۲ رسانندگی الکتریکی

در حضور تنها یک میدان الکتریکی dc، معادلهٔ (۳-۲۳) جواب **حالت مانای** زیر را دارد

$$\mathbf{v} = -\frac{e\tau}{m_e}\mathbf{E} \qquad (۲۴-۳)$$

ثابت تناسب بین $|\mathbf{v}|$ و $|\mathbf{E}|$ به **تحرک پذیری** الکترونها، μ_e، معروف است. بنابراین

$$\mu_e = +\frac{e\tau}{m_e} \qquad (۲۵-۳)$$

چگالی جریان الکتریکی $\mathbf{j}$ عبارت است از $n(-e)\mathbf{v}$ که $n = \frac{N}{V}$ چگالی الکترونی است. از این رو

$$\mathbf{j} = \frac{ne^2\tau}{m_e}\mathbf{E} = \sigma\mathbf{E} \qquad (۲۶-۳)$$

که قانون اهم است با رسانندگی الکتریکی

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e} = ne\mu_e \qquad (۲۷-۳)$$

در یک بلور کامل از یک فلز خالص برخوردهای عمدهٔ الکترونهای رسانشی با ارتعاشات گرمایی شبکه است[1]؛ این برخورد را می‌توان به صورت پراکندگی یک الکترون توسط یک فونون نیز تصور کرد، این تصویر در بخش ۳-۳-۴ بیشتر دنبال می‌شود. این پراکندگی الکترون - فونون یک زمان برخورد تابع دما، $\tau_{ph}(T)$، می‌دهد که با $T \to 0$ به بینهایت می‌گراید. در یک فلز واقعی الکترونها با اتمهای ناخالصی، تهی جاها (اتمهای مفقود شده) و دیگر عیبهای

۱- از آن جا که یک فلز الکترون آزاد فاقد شبکه است، ممکن است بی‌معنا به نظر برسد که به ارتعاشات شبکه درون آن اشاره شود. در فصل بعد توضیح می‌دهیم که چرا الکترونهای رسانشی می‌توانند در حضور پتانسیل دوره‌ای یونهای مثبت نیز نظیر الکترونهای آزاد رفتار کنند. الکترونها توسط هر انحرافی از شبکهٔ دوره‌ای کامل نظیر آنچه توسط ارتعاشات شبکه حاصل می‌شود پراکنده می‌شوند.

ساختاری نیز برخورد می‌کنند؛ برخوردها حتی در $T = ۰$ نیز به زمان پراکندگی متناهی $\tau_۰$ منجر می‌شوند. در دمای متناهی، آهنگ برخورد الکترونها در یک بلور اندکی ناکامل با تقریب خوبی توسط افزودن آهنگ برخورد با ناکاملیها در **دمای صفر** $\frac{۱}{\tau_۰}$ به آهنگ برخورد با فونونها در بلور کامل $\frac{۱}{\tau_{ph}(T)}$ به دست می‌آید به این ترتیب

$$\frac{۱}{\tau} = \frac{۱}{\tau_{ph}(T)} + \frac{۱}{\tau_۰} \qquad \textbf{(۳-۲۸)}$$

این فرض در صورتی معتبر است که دو سازوکار پراکندگی مستقل از یکدیگر عمل کنند، یعنی اگر پراکندگی توسط ناکاملیها مستقل از دما باشد و ناکاملیها آن قدر زیاد نباشند که بر پراکندگی توسط فونونها اثر قابل توجهی داشته باشند. با توجه به معادلهٔ (۳-۲۸) مقاومت ویژهٔ الکتریکی $\rho\ (=\frac{۱}{\sigma})$ را می‌توان به صورت مجموع دو جمله نوشت،

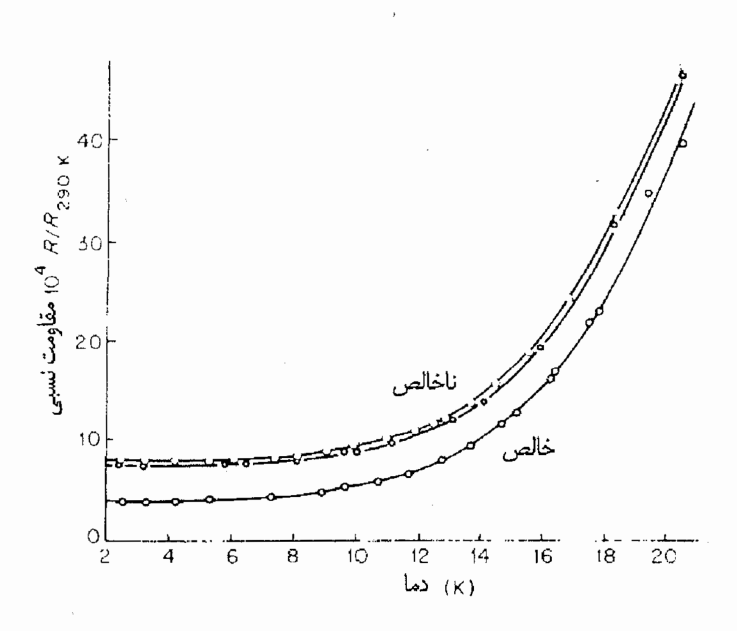
$$\rho = \frac{m_e}{ne^۲\tau} = \frac{m_e}{ne^۲\tau_{ph}(T)} + \frac{m_e}{ne^۲\tau_۰} = \rho_۱(T) + \rho_۰ \qquad \textbf{(۳-۲۹)}$$

معادله (۳-۲۹) **قاعدهٔ ماتیسن** را توصیف می‌کند، که در شکل ۳-۶ برای سدیم رسم شده است، طبق این قاعده، منحنی‌های مقاومت ویژه برحسب دما برای نمونه‌های **مختلف** از یک ماده تنها در یک جا به جایی با یکدیگر اختلاف دارند؛ این جابه جایی به تغییر $\rho_۰$ به دلیل چگالیهای متفاوت ناکاملی، مربوط می‌شود. بخش وابسته به دمای مقاومت ویژه $\rho_۱(T)$ به **مقاومت ویژهٔ ایده‌آل** معروف است و $\rho_۰$ **مقاومت ویژه باقیمانده** نامیده می‌شود؛ تمامی نمونه‌ها حتی خالص‌ترین آنها با سرد شدن تا دمای جوش هلیوم مایع، یعنی $۴/۲K$، نیز عملاً مقاوت ویژهٔ باقیماندهٔ خود را دارند. نسبت مقاومت ویژه در دمای اتاق به مقاومت ویژهٔ باقیمانده به **نسبت مقاومت باقیمانده** معروف است. این نسبت برای تک بلورهای بازپخت شدهٔ بسیار خالص می‌تواند به بزرگی $۱۰^۶$ باشد.

رسانندگی سدیم در دمای اتاق $۲/۰ \times ۱۰^۷ \Omega^{-۱} m^{-۱}$ است، به گونه‌ای که رسانندگی باقیمانده برای خالص‌ترین نمونه در شکل ۳-۶ عبارت است از $۱۰^{۱۰}\Omega^{-۱}m^{-۱}$؛ به کمک این داده‌ها، می‌توانیم زمان برخورد را برآورد کنیم. با انتخاب $n = ۲/۷ \times ۱۰^{۲۸}\ m^{-۳}$، $m_e = m$ و به کار بردن معادلهٔ (۳-۲۷) داریم

در دمای اتاق $\qquad \tau = \frac{m\sigma}{ne^۲} \sim ۲/۶ \times ۱۰^{-۱۴}\ s$

در $T = ۰$ $\qquad \sim ۷/۰ \times ۱۰^{-۱۱} s$



شکل ۳-۶: منحنی‌های مقاومت ویژه- دما برای نمونه‌های سدیم با خلوص متفاوت *

سرعت فرمی الکترون آزاد در سدیم برابر است با ms^{-1} 10^6 × ۱/۱ به گونه‌ای که مسافت آزاد متوسط الکترون در دمای اتاق برابر $29nm$ و در $T=0$ مساوی $77\mu m$ است؛ این مقادیر بسیار بزرگتر از فاصلهٔ بین اتمی هستند، و این مؤید آن است که الکترونها با خود اتمها برخورد نمی‌کنند. بحث وابستگی دمایی مقاومت ویژهٔ ایده‌آل را به بخش ۳-۳-۴ موکول می‌کنیم.

۳-۳-۳ رسانندگی گرمایی

رسانندگی گرمایی فلزات، به دلیل انتقال گرما توسط الکترونهای رسانشی، معمولاً خیلی بزرگتر از رسانندگی گرمایی غیرفلزات است (ولی بخش ۲-۸-۴ را نیز ببینید)[1]. الکترونهایی که از ناحیهٔ داغ تر فلز می‌آیند انرژی گرمایی بیشتری نسبت به الکترونهای ناحیهٔ سردتر حمل می‌کنند، که باعث شارش خالص گرما می‌شود. سازوکار رسانشی گرما در یک گاز نیز به همین

---

* این نتایج با کسب مجوز از مرجع زیر اقتباس شده است

D.K.C Macdonald and K.Mendelssohn, Proc. R. Soc. A 202, 103 (1950)

۱- رسانندگی گرمایی ناشی از فونون‌ها، در فلزات عموماً کم‌تر از غیرفلزات است، چون فونونها در فلز توسط الکترونهای رسانشی پراکنده می‌شوند.

صورت است و همان گونه که در بحث رسانش توسط فونونها در بخش ۲-۸ می‌آید، از نتایج نظریهٔ جنبشی مقدماتی (معادلهٔ (۲-۷۵)) برای رسانش گرمایی استفاده خواهیم کرد. بنابراین

$$K = \frac{1}{3} C_V \, v_F \, l \qquad (۳-۳۱)$$

که C_V ظرفیت گرمایی به ازاء واحد حجم و l مسافت آزاد میانگین است. v_F را برای سرعت میانگین الکترونهای درگیر در رسانندگی گرمایی گرفته‌ایم، چون تنها حالتهای الکترونی در گسترهٔ $k_B T$ حول ε_F عدد اشغال خود را با تغییر دما تغییر می‌دهند. مسافت آزاد میانگین این الکترونها $v_F \tau$ است و بنابراین با به کاربردن $\varepsilon_F = \frac{1}{2} m_e v_F^2$ و معادلهٔ (۳-۱۹) برای C_V در می‌یابیم که

$$K = \frac{1}{3} C_V \, v_F^2 \, \tau = \frac{1}{3} \, \frac{\pi^2}{2} \frac{N}{V} \, k_B \left(\frac{T}{T_F}\right) \frac{2}{m_e} \, \varepsilon_F \tau$$

$$= \frac{\pi^2 n k_B^2 \, T\tau}{3 m_e} \qquad (۳-۳۲)$$

توجه به این نکته جالب است که نتیجهٔ نهایی در معادلهٔ (۳-۳۲) برای یک گاز الکترونی **کلاسیکی** نیز از نظر مرتبهٔ بزرگی صحیح است : گرمای ویژه، با ضریبی از مرتبه (T_F / T) بزرگتر است ولی مربع سرعت گرمایی با همین ضریب کوچک‌تر است.

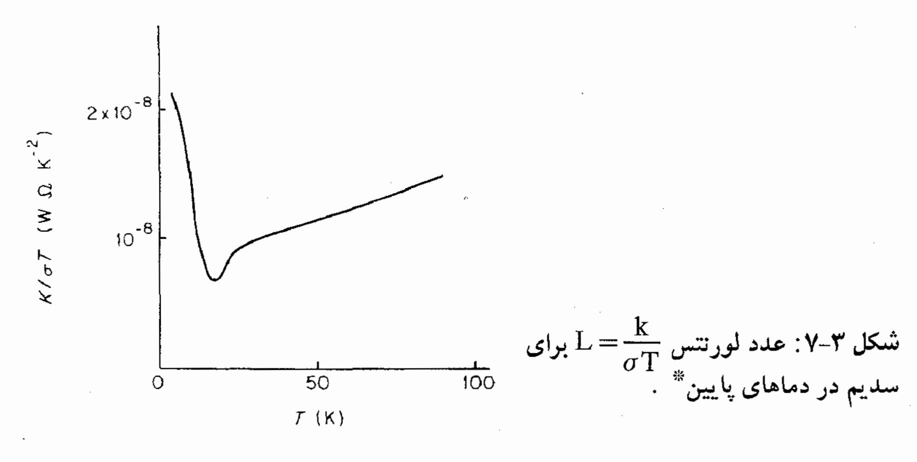
۳-۳-۴ قانون ویده‌مان - فرانتس و وابستگی دمایی رسانندگی‌های الکتریکی و گرمایی

ترکیب $\frac{n\tau}{m_e}$ در هر دو معادلهٔ (۳-۲۷) و (۳-۳۲) ظاهر می‌شود، در نتیجه با تقسیم این دو معادله بر یکدیگر در می‌یابیم که نسبت رسانندگیهای الکتریکی و گرمایی مستقل از پارامترهای گاز الکترونی است. داریم

$$\frac{K}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e}\right)^2 = 2/45 \times 10^{-8} \, W \Omega K^{-2} \qquad (۳-۳۳)$$

که **قانون ویده‌مان- فرانتس** نامیده می‌شود. نسبت $\frac{K}{\sigma T}$ **عدد لورنتس** خوانده می‌شود و با L نمایش داده می‌شود. برای مس در صفر درجهٔ سانتیگراد، $L = 2/23 \times 10^{-8} \, W\Omega K^{-2}$، یعنی قانون ویده‌مان- فرانتس نسبتاً خوب کار می‌کند، در حقیقت برای بیشتر فلزات در دماهایی از این مرتبه چنین است. شکل ۳-۷ منحنی عدد لورنتس سدیم را به صورت تابعی از دما از ۰ تا $100K$ نمایش می‌دهد؛ می‌بینیم که L در بیشتر این گسترهٔ دمایی به طور مشخص زیر مقدار پیش‌بینی شده است ولی در حد $T \to 0$ که برخورد با ناخالصیها عمده‌ترین سازوکار پراکندگی است، L به سمت مقدار پیش بینی شده میل می‌کند.

شکست قانون ویده‌مان - فرانتس ناشی از نارسایی این فرض ما است که زمانهای برخوردی



شکل ۳-۷: عدد لورنتس $L=\frac{k}{\sigma T}$ برای سدیم در دماهای پایین*.

که شارش جریانهای الکتریکی و گرمایی را محدود می‌کنند، یکسان در نظر گرفته می‌شوند. برای توضیح این امر باید فرایندهای برخورد را با تفصیل بیشتری بررسی کنیم، و ما این کار را با بررسی تغییر در اشغال حالتهای الکترونی در فضای **k** برای حالتهایی که حامل جریان‌اند آغاز می‌کنیم.

با توجه به معادلات (۳-۲۲) و (۳-۲۴)، سرعت رانش **v** وابسته به یک جریان الکتریکی با تغییر $\delta\mathbf{k}$ در بردار موج هر الکترون، متناظر است به صورتی که

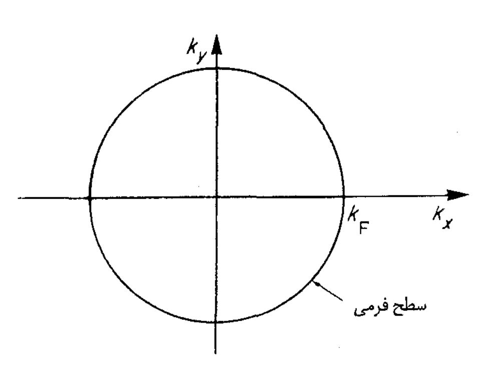
$$\delta\mathbf{k}=\frac{m_e}{\hbar}\ \mathbf{v}=-\frac{e\tau}{\hbar}\ \mathbf{E} \qquad (۳-۳۴)$$

بنابراین حالت حامل جریان الکتریکی متناظر است با انتقال به اندازهٔ $\delta\vec{k}$ در تمامی توزیع الکترونی در فضای **k**، یعنی تمامی کرهٔ فرمی، که در شکل ۳-۸ نمایش داده شده است؛ از بین رفتن تیزی سطح فرمی ناشی از دمای متناهی، تغییر اساسی در نحوهٔ توزیع مجدد الکترونها در فضای **k** در اثر یک جریان الکتریکی متناهی ایجاد نمی‌کند. جابه جایی نشان داده شده در شکل ۳-۸ (ب) به شارش جریان الکتریکی در جهت x- مربوط می‌شود زیرا تعداد الکترونهای با اندازه حرکت در جهت x+ بیش از این تعداد در جهت x- است. سرعت رانش الکترون، برای چگالی الکترونی نوعی در یک فلز، و برای چگالی جریانی برابر $10^{7}Am^{-2}$ (که در حدود بزرگترین مقداری است که معمولاً به کار می‌رود)، برابر است با

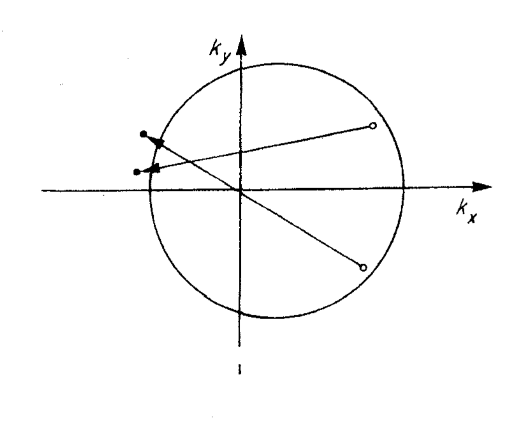
$$v=\frac{j}{ne}\sim\frac{10^{7}}{10^{28}\times10^{-19}}\ ms^{-1}\sim10\,mm\ s^{-1}$$

* این نتایج با کسب مجوز از مرجع زیر اقتباس شده است

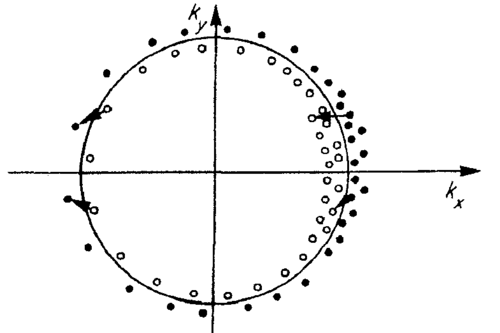
R.Berman and D.K.C. Macdonald, Proc. R. Soc. A 209, 368 (1951)



(الف) سطح فرمی تعادلی در $T = ۰$



(ب) حالت حامل جریان الکتریکی با فرایندهای نوعی واهلش



(ج) حالت حامل جریان گرما در گرادیان دما با فرایندهای واهلش باتغییر اندک در اندازه حرکت

شکل ۳-۸

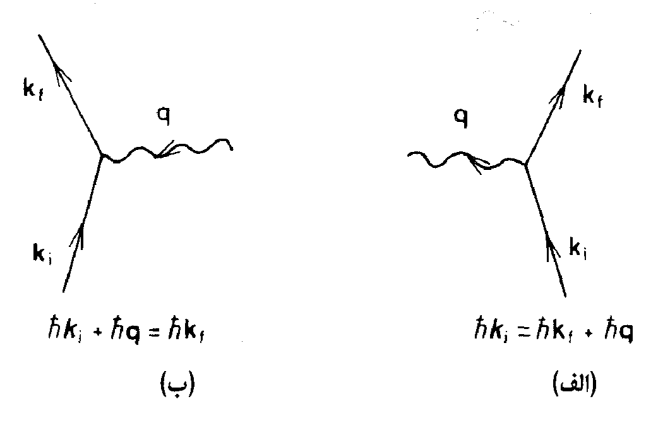
این در حدود $۱۰^{-۸}\nu_F$ است، بنابراین جابه جایی کرهٔ فرمی در شکل ۳-۸ (ب) واقعاً ناچیز است. برای آن که جریان به سمت صفر میل کند، کرهٔ فرمی باید به حالت منتقل نشدهٔ خود در شکل ۳-۸ (الف) واهلش کند، و برخورد مؤثر در حصول این وضعیت ازنوعی است که در آن یک الکترون از طرف راست کرهٔ فرمی جدا و به طرف چپ آن بپیوندد، انتقالهای نوعی در شکل ۳-۸ (ب) نمایش داده شده‌اند، و دیده می‌شود که این انتقالها با تغییری در بردار **k** الکترون

همراه‌اند که بزرگی آن در حدود قطر کرهٔ فرمی است، یعنی تغییری از مرتبهٔ $2\mathbf{p}_F$ در اندازه حرکت.

شکل ۳-۸ (ج) توزیع الکترونی را در حضور گرادیان دما نشان می‌دهد. به علت دمای متناهی، تعدادی حالتهای تهی (دایره‌های خالی) در زیر سطح فرمی و تعدادی حالتهای اشغال شده (دایره‌های پر) بالای آن وجود خواهد داشت. اگر نمونه در انتهای طرف چپ داغ‌تر باشد، الکترونهایی که از طرف چپ حرکت می‌کنند (الکترونهای با $K_x > 0$) در مقایسه با آنهایی که از طرف راست می‌آیند (الکترونهای با $k_x < 0$) توزیعی متناظر با دمای بالاتری خواهند داشت. این وضعیتی است که در شکل ۳-۸ (ج) نشان داده شده است، که در آن سطح فرمی برای $k_x > 0$ نامشخص‌تر از سطح فرمی برای $k_x < 0$ است. متذکر می‌شویم که نامشخص شدن سطح به صورتی بسیار اغراق آمیز نمایش داده شده است؛ کل نامشخصی در دمای اتاق از مرتبهٔ ۱٪ مقدار k_F است، اختلاف در نامشخصی در دو طرف که ناشی از گرادیان دماست متناظر است با اختلاف دما در یک مسافت آزاد میانگین که توعاً در دمای اتاق برابر $100\ nm$ است. فرایندهای پراکندگی‌ای که در محدود کردن رسانندگی گرمایی مؤثرند آنهایی هستند که نامشخصی در سطح فرمی را حبران می‌کنند؛ گرچه این وضعیت توسط پراکندگی‌های همراه با تغییر زیاد در اندازه حرکت نظیر آنهایی که در شکل ۳-۸ (ب) نشان داده شده است حاصل می‌شود، ولی پراکندگیهای با تغییر اندک در اندازه حرکت نیز آن گونه که در شکل ۳-۸ (ج) نمایش داده شده‌اند در این کار مؤثرند. از آن جا که تعداد پراکندگیهای مؤثر در محدود کردن رسانندگی گرمایی بیشترند، لذا زمان واهلش برای رسانندگی گرمایی کوتاه‌تر است و عدد لورنتس پایین‌تر از مقدار ویده‌مان - فرانتس می‌شود.

برای بررسی فراتر این موضوع و توصیف وابستگی دمایی رسانندگیهای الکتریکی و گرمایی باید پراکندگی الکترونها توسط ارتعاشات شبکه را بررسی کنیم؛ این فرایند را می‌توان به صورت برخورد بین الکترونها و فونونها با رعایت پایستگی انرژی و اندازه حرکت تصویر کرد[1]. دو تا از مهمترین فرایندها عبارتند از جذب و گسیل یک فونون توسط الکترون به صورتی که در شکل ۳-۹ نشان داده شده است، تغییرات در اندازه حرکت و انرژی الکترون برابر است با اندازه حرکت و انرژی فونون جذب یا گسیل شده. بنابراین بیشترین تغییر در انرژی یک الکترون در چنین فرایندی برابر با انرژی بیشینهٔ فونون است، که از مرتبهٔ $k_B\theta_D$ است، θ_D دمای دیبای است و برای یک فلز نوعی از مرتبهٔ دمای اطاق است (جدول ۱-۲). بنابراین بیشترین تغییر در انرژی

۱- این گزاره را می‌توان با دنبال کردن همان شگردی که در بخش ۱۲-۴ برای تثبیت پایستگی انرژی و اندازه حرکت در پراکندگی نوترونها توسط فونونها به کار گرفته شده است اثبات کرد. در اینجا نیازی نیست که نگران نکات ظریف وابسته به تمایز بین اندازه حرکت واقعی و اندازه حرکت بلوری باشیم.

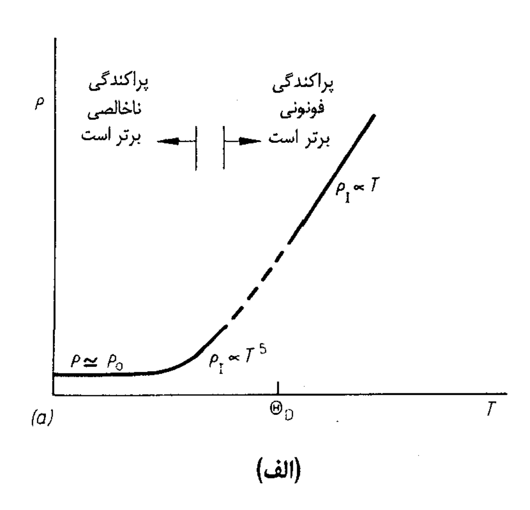


شکل ۳-۹ پراکندگی یک الکترون توسط (الف) جذب فونون و (ب) گسیل فونون. خطوط مستقیم الکترونها را نمایش می‌دهد و خطوط موجی فونونها را. اعداد موج آغازین و پایانی الکترون به ترتیب برابر k_i و k_f است، $\mathbf{q}$ عدد موج فونون است. در هر مورد معادلهٔ پایستگی اندازه حرکت داده شده است.

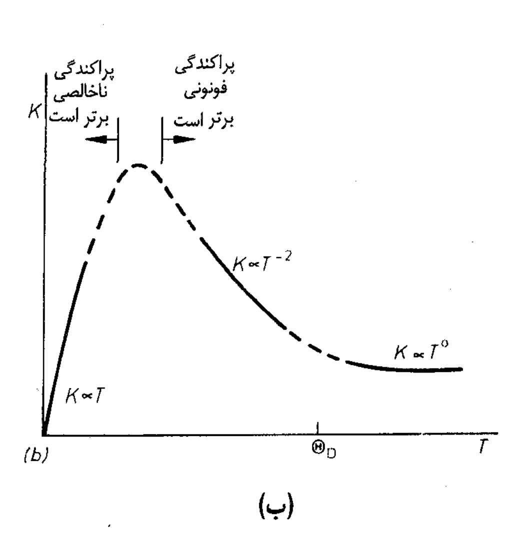
یک الکترون بسیار کمتر از انرژی الکترون بر روی سطح فرمی یعنی $k_B T_F$ است؛ از آن جا که الکترونی که برخورد می‌کند باید به یک حالت تهی پراکنده شود و حالت‌های تهی تنها در مجاورت سطح فرمی هستند، این پیامد مهم حاصل می‌شود که تنها الکترونهای نزدیک سطح فرمی می‌توانند توسط فونونها پراکنده شوند.

یک فونون نوعی در دماهای بالا ($T>>\theta_D$) دارای انرژی $k_B \theta_D$ و در نتیجه طول موجی در حدود فاصلهٔ بین اتمی است؛ چون الکترونهای روی سطح فرمی نیز طول موجهایی از همین مرتبه دارند، می‌بینیم که فونونهای نوعی اندازه حرکت کافی دارند تا باعث برخوردهای با انتقال اندازه حرکت بزرگ نظیر شکل ۳-۸ (ب) که برای ایجاد مقاومت الکتریکی مورد نیاز است بشوند. در نتیجه زمانهای واهلش برای مقاومتهای ویژهٔ الکتریکی و گرمایی یکسانند و قانون ویده‌مان - فرانتس به خوبی تبعیت می‌شود. مسافت آزاد میانگین واقعی الکترون l_{ph} نسبت معکوس با تعداد فونونها دارد. از آن جا که انرژی ارتعاش شبکه در دمای بالا مساوی $3Nk_B T$ است و انرژی فونون ثابت است، تعداد فونونها متناسب با T است. بنابراین زمان پراکندگی الکترون τ_{ph} نسبت معکوس با T دارد، و با نشاندن این در معادلهٔ (۳-۲۹) برای مقاومت ویژه ایده‌ال در می‌یابیم که (شکل ۳-۱۰ (الف))

$$\rho_1(T) = \frac{m_e}{ne^2 \tau_{ph}} = \frac{m_e v_F}{ne^2 l_{ph}} \propto T \qquad (T>>\theta_D)$$



(الف)



(ب)

شکل ۳-۱۰ طرحوارهٔ وابستگی‌های دمایی در (الف) مقاومت ویژهٔ الکتریکی و (ب) رسانندگی گرمایی یک فلز

به همین ترتیب با نشاندن $\tau_{ph} \propto T^{-1}$ در معادلهٔ (۳-۳۲) پیش بینی می‌شود که رسانندگی گرمایی فلزات در دماهای بالا مستقل از دماست (شکل ۳-۱۰ (ب)).

در دماهای پایین ($T << \theta_D$)، انرژی میانگین فونون از مرتبهٔ $k_B T$ است، و چون انرژی ارتعاش شبکه متناسب با T^4 است (معادله (۲-۴۷))، لذا تعداد فونونها متناسب با T^3 است. فونونهای با انرژی $k_B T$ دقیقاً انرژی لازم برای پراکندگیهای نشان داده شده

در شکل ۳-۸ (ج) را که در ایجاد مقاومت گرمایی مؤثرند دارا هستند؛ بنابراین مسافت آزاد میانگین متناظر l_{th} و زمان پراکندگی τ_{th} که رسانندگی گرمایی را تعیین می‌کنند، نسبت معکوس با تعداد فونونها دارند، به گونه‌ای که

$$\tau_{th} \propto T^{-3}$$

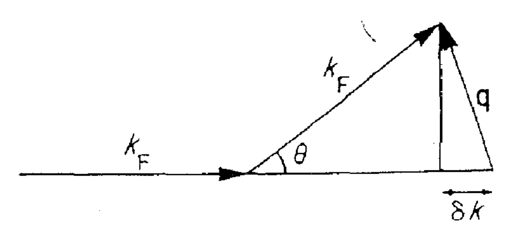
بنابراین از معادلهٔ (۳-۳۲) انتظار داریم که رسانندگی گرمایی محدود شده توسط فونونها، به ازای $T<<\theta_D$ وابستگی دمایی $K \propto T^{-2}$ را بروز دهد (شکل ۳-۱۰ (ب)).

ولی در مورد مقاومت الکتریکی، اندازه حرکت فونون نوعی است که اهمیت دارد. چون فونونی با انرژی $k_B \ \theta_D$ اندازه حرکتی از مرتبهٔ p_F دارد، فونون با انرژی $k_B \ T$ اندازه حرکتی از مرتبهٔ $p_F \left(\frac{T}{\theta_D}\right)$ خواهد داشت، که این برای $T << \Theta_D$ بسیار کوچکتر از آن است که برخوردهای با تغییر بزرگ اندازه حرکت نظیر شکل ۳-۸ (ب) را که در ایجاد مقاومت الکتریکی مؤثرند باعث شود؛ تغییرات بزرگ در اندازه حرکت الکترونها تنها در صورتی که تعداد زیادی از تغییرات کوچک با هم جمع شوند حاصل می‌شوند. چون حالتهای الکترونی آغازی و پایانی باید به سطح فرمی نزدیک باشند، یک تغییر کوچک در اندازه حرکت دال بر پراکندگی تحت زاویهٔ کوچک θ نظیر شکل ۳-۱۱ است. میزان تأثیر یک برخورد در ایجاد مقاومت الکتریکی را می‌توان با اندازه‌گیری اتلاف اندازه حرکت $\hbar \delta k$ الکترون نسبت به راستای جهت اصلی حرکت آن، اندازه‌گیری کرد، و با توجه به شکل ۳-۱۱ برای مقادیر کوچک θ این اتلاف برابر است با $\hbar q^2 / 2k_F$ که برای فونونهای نوعی در دمای پایین متناسب با T^2 است. از این رو به آهنگ پراکندگی $1/\tau_{el}$ که در محاسبه مقاومت الکتریکی به‌کار می‌رود باید وزنی برابر با عامل **تأثیر** دادکه از مرتبهٔ $\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^2$ است به گونه‌ای‌که

$$\frac{1}{\tau_{el}} \sim \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^2 \frac{1}{\tau_{th}} \propto T^5$$

و از معادله (۳-۲۹)،

$$\rho_1(T) \propto T^5 \qquad (۳۵\text{-}۳)$$



شکل ۳-۱۱ : تغییر در اندازه حرکت الکترونی که با جذب یک فونون با بردار موج q تحت زاویهٔ θ پراکنده می‌شود. توجه کنید که بزرگی اندازه حرکت الکترون تغییر نمی‌کند، چون الکترون در حالتی نزدیک سطح فرمی باقی می‌ماند.

بنابراین در این ناحیه از دما قانون ویده‌مان- فرانتس معتبر نیست.

در پایین‌ترین دماها، برخوردهای الکترون- ناخالصی سهم عمده را دارند[۱]. این برخوردها کشسان هستند، از این رو نمی‌توانند برخوردهایی نظیر آن چه در شکل ۳-۸ (ج) نشان داده شده است را به وجود آورند، اما توانایی آن را دارند که برخوردهای با تغییر بزرگ در اندازه حرکت نظیر موارد شکل ۳-۸ (ب) را تولید کنند؛ بنابراین زمانهای پراکندگی مؤثر برای رسانندگی الکتریکی و گرمایی یکسانند و قانون ویده‌مان- فرانتس مجدداً برقرار است. مسافت آزاد میانگین ناشی از پراکندگی الکترون- ناخالصی باید مستقل از دما باشد، که منجر به رسانندگی الکتریکی مستقل از دما و رسانندگی گرمایی متناسب با T می‌شود. وابستگیهای دمایی مقاومت ویژهٔ الکتریکی و رسانندگی گرمایی که ما به دست آورده‌ایم در شکل‌های ۳-۱۰ (الف) و ۳-۱۰ (ب) خلاصه شده‌اند؛ بسیاری از عناصر فلزی با خلوص بالا نسبتاً به خوبی از این وابستگیها تبعیت می‌کنند[۲].

وابستگی پیش بینی‌شده T^5 برای مقاومت ویژهٔ ایده‌آل در دماهای پایین (معادلهٔ (۳-۳۵)) در بعضی فلزات مشاهده نمی‌شود. این ممکن است به علت **کشیدگی فونون** باشد؛ برخوردهای الکترون- فونون باعث می‌شود که فونونها با سرعت رانش نزدیک به سرعت رانش الکترونها کشیده شوند و در نتیجه تأثیر آنها در کاهش اندازه حرکت رانش الکترونها کمتر شود. سهم برخورد الکترون - الکترون در مقاومت ویژه نیز ممکن است وابستگی T^5 را بپوشاند. از آن جا که در برخورد دو الکترون اندازه حرکت پایسته است، در ابتدا این گونه به نظر می‌رسد که چنین برخوردهایی به مقاومت ویژهٔ الکتریکی منجر نمی‌شوند؛ در بخش ۲-۸-۱ با استدلال مشابهی پیشنهاد شد که برخوردهای فونون - فونون نمی‌توانند رسانندگی گرمایی فونونها را محدود کنند. در آن جا دیدیم که وجود یک شبکهٔ دوره‌ای به آن معناست که اندازه حرکت مربوط به یک فونون را نمی‌توان به طور قطعی تعیین کرد، و این امر وجود پراکندگیهای واگرد و مقاومت گرمایی وابسته به آنها را مجاز می‌کرد. وقتی اثر پتانسیل دوره‌ای شبکه به حساب آید اندازه حرکت الکترون نیز به همین روش نامعین می‌شود (بخش ۴-۳-۳). پراکندگیهای الکترون-الکترون واگرد حاصل سهم کمی در مقاومت ویژهٔ الکتریکی دارند که دارای همان

۱- در فلزات بسیار خالص برخورد الکترونها با دیوارهای نمونه می‌توانند مهم شوند و در این صورت رسانندگی الکتریکی مؤثر به شکل و اندازه نمونه بستگی پیدا می‌کند؛ این مثال دیگری از اثر اندازه است (بخش ۲-۸-۴). اثرهای اندازه به سادگی در لایه‌های نازک یا سیمهای باریک که در آنها لااقل یکی از ابعاد نمونه کوچک است دیده می‌شوند.

۲- وقتی یک فلز غیر مغناطیسی حاوی مقدار کمی ناخالصی مغناطیسی باشد گاهی تفاوت جالب توجهی مشاهده می‌شود، برای مثال در مورد ناخالصی *Fe* در *Cu*. مقاومت ویژه با کاهش دما از کمینه‌ای دردماهای پایین می‌گذرد. این اثر کوندو است *(J.Kondo, Solid state Phys. 23, 183 (1769))*

وابستگی دمایی T^2 نظیر آهنگ پراکندگی الکترون - الکترون است (بخش ۱۳-۵-۴)[1] .

۳-۳-۵ اثرهال

تا این جا با به کار بردن نظریهٔ الکترون آزاد، در توصیف خواص فلزات کاملاً موفق بوده‌ایم. در این بخش، این روند موفقیت آمیز دچار وقفه می‌شود به طوری که این نظریه حتی در تعیین علامت صحیح برای اثر هال برای **بعضی** از فلزات با شکست روبه رو می‌شود. وقتی فلزی در یک میدان مغناطیسی $\mathbf{B}$ قرار می‌گیرد و چگالی جریان $\mathbf{j}$ از آن عبور می‌کند، یک میدان الکتریکی عرضی E_H طبق رابطهٔ زیر در آن برپا می‌شود

$$\mathbf{E}_H = R_H \mathbf{B} \times \mathbf{j} \qquad (۳-۳۶)$$

این **اثر هال** است و R_H ضریب هال نامیده می‌شود.

هندسهٔ این آزمایش در شکل ۳-۱۲ نشان داده شده است. منشأ این اثر نیروی لورنتس $-e\,\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ بر روی الکترون‌های رسانشی در میدان مغناطیسی است. شکل ۳-۱۲ جهت سرعت رانشی $\mathbf{v}$ الکترونها که متناظر است با جریان $\mathbf{j}$ در جهت x را نمایش می‌دهد. نیروی لورنتس گرایش به منحرف کردن الکترونها به طرف پایین دارد و این باعث انباشته شدن سریع یک چگالی بار منفی بر روی سطح پایینی فلز می‌شود. میدان الکتریکی حاصل، $\mathbf{E}_H$ در جهت $-y$ باعث تداوم جریان در جهت x می‌شود، برای یک میلهٔ طویل با اتصالات الکتریکی در دوانتها نیز باید چنین باشد

بنابراین، در حالت مانا، با $\nu_y = ۰$، مؤلفه‌های x و y معادلهٔ حرکت (۳-۲۳) در این هندسه به قرار زیر است

$$m_e \frac{\nu_x}{\tau} = -e E_x \qquad (۳-۳۷)$$

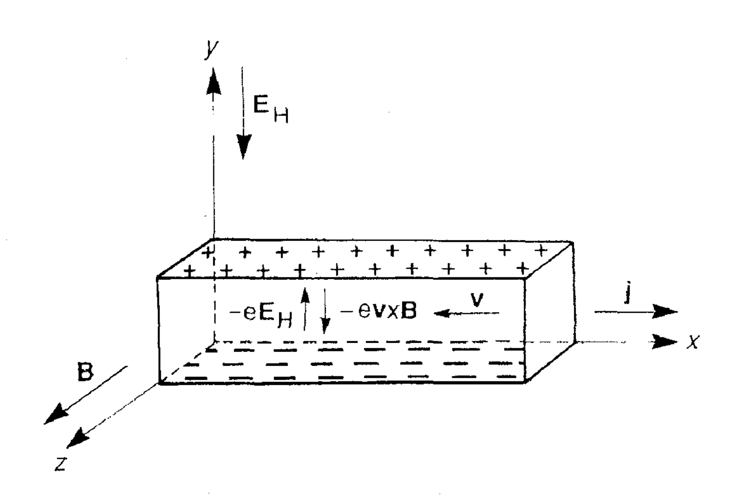
$$۰ = -e\,(E_y - \nu_x B)$$

اولین معادله پیش‌بینی می‌کند که رسانندگی الکتریکی σ تحت تأثیر حضور میدان مغناطیسی واقع نمی‌شود[2] (نظیر معادلهٔ (۳-۲۴)). از معادلهٔ دوم در می‌یابیم که

$$E_y = \nu_x B = j_x B / (-ne) \qquad (۳-۳۸)$$

۱- مرور جدیدی بر رسانندگی الکتریکی و گرمایی فلزات در دماهای پایین در مقالهٔ زیر آمده است.
R.J.M. Van Vacht et al., Rep. prog. Phys. 38, 853 (1985)

۲- در حقیقت مقاومت ویژهٔ الکتریکی فلزات غالباً وابستگی ضعیفی به میدان مغناطیسی دارد. تغییر در مقاومت ویژه، **مغناطو مقاومت ویژه** نامیده می‌شود، و می‌تواند ناشی از شکست پیش فرض ما مبنی بر انتخاب یک زمان واهلش واحد برای تمامی الکترونها در یک بلور غیرهمسانگرد باشد.



شکل ۳-۱۲ : هندسهٔ اثر هال. نیروی لورنتس بر روی الکترونها، $-e\mathbf{v}\times\mathbf{B}$ ، با نیروی $-e\mathbf{E}_H$ ناشی از میدان هال $\mathbf{E}_H$ موازنه می‌شود.

به گونه‌ای که، در مقایسه با معادلهٔ (۳-۳۶)، داریم

$$R_H = -\frac{1}{ne} \qquad (۳۹-۳)$$

بنابراین ضریب هال باید منفی باشد و مقیاس مستقیمی از تراکم الکترون آزاد ارائه دهد. با ترکیب معادلات (۳-۲۷) و (۳-۲۹) در می‌یابیم که

$$\mu = |R_H|\,\sigma \qquad (۴۰-۳)$$

در نتیجه می‌توان تحرک پذیری الکترون μ را از روی مقادیر اندازه‌گیری شدهٔ R_H و σ تعیین کرد.

اگر N تعداد **اتمها** در واحد حجم باشد در آن صورت کمیت $-1/(R_H\,Ne)$ باید مساوی $\frac{n}{N}$ باشد و بنابراین تخمینی از تعداد الکترونهای رسانشی به ازای هر اتم را می‌دهد؛ مقادیر این کمیت برای فلزات مختلف در جدول ۳-۱ نشان داده شده است. مقادیر اندازه‌گیری شده برای عناصر گروه‌های I و III منطقی به نظر می‌رسند، همین طور مقدار مربوط به منیزیم از گروه II. ولی، مقادیر مربوط به عناصر بریلیوم و کادمیوم از گروه II منفی هستند، این نشان می‌دهد که ذرات باردار **مثبت** عامل رسانش در این فلزات هستند! برای توجیه این نتیجهٔ شگفت لازم است اثر پتانسیل دوره‌ای شبکه بر حالتهای الکترون رسانش در نظر گرفته شود، و این موضوع فصل ۴ است.

جدول ۳-۱ : ضریب هال برای فلزات مختلف. بنابر معادلهٔ (۳-۳۹)، باید $۱/R_H Ne$ برابر تعدادالکترونهای رسانشی به ازای هر اتم باشد. علامت منفی برای این کمیت نشانگر مقدار مثبتی برای R_H است و در نتیجه نشان می‌دهد که حاملهای بار ذراتی با بار مثبت‌اند!

فلزات	گروه	$-۱/(R_H Ne)$
Na	*I*	+۰/۹
K		+۱/۱
Cu	*IB*	+۱/۳
Au		+۱/۵
Be	*II*	−۰/۲
Mg		+۱/۵
Cd	*IIB*	−۲/۲
Al	*III*	−۳/۵

داده‌ها از مرجع زیر است:

American Institute of Physics Hand book 3rd ed. Mc Graw-Hill, New York (1972)

مسایل ۳

۳-۱ تابع کار یک فلز کمینهٔ انرژی لازم برای کندن یک الکترون از فلز است، مقدار نوعی این کمیت $۳eV$ است. مقداری برای "طول نفوذ" تابع موج الکترون به خارج فلز برای الکترونهای با انرژی فرمی به دست آورید.

۳-۲ لیتیوم فلزی ساختار مکعبی مرکز حجمی با یاختهٔ یکه به ابعاد ۳/۵ Å دارد. با به کاربردن مدل الکترون آزاد، پهنای نوار گسیلی K را برای پرتوهای X نرم حاصل از لیتیوم حساب کنید. انتظار دارید که پهنای گسیل چه نوع بستگی به دما داشته باشد؟

۳-۳ نشان دهید که انرژی جنبشی یک گاز الکترون آزاد در صفر مطلق برابر است با

$$E = \frac{۳}{۵} N \varepsilon_F$$

که ε_F انرژی فرمی است. عبارتهایی برای فشار $P = -\frac{\partial E}{\partial V}$ و مدول کپه‌ای $B = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)$ به دست آورید.

سهم الکترونهای رسانش در B را برای پتاسیم تخمین بزنید و جواب خود را با مدول کپه‌ای اندازه‌گیری شده در تجربه، $۰/۳۷ \times ۱۰^{۱۰}\ Nm^{-۲}$ ، مقایسه کنید.

۳-۴ سهم الکترونهای رسانش را به معادلهٔ (۲-۵۹) بیفزایید تا انرژی آزاد هلمولتز یک فلز به دست آید. سپس محاسبهٔ بخش ۲-۷-۱ را برای به دست آوردن مقداری برای ضریب

انبساط گرمایی یک فلز تعمیم دهید.

۳-۵ ثابت کنید که اتلاف اندازه حرکت الکترون در راستای جهت اصلی حرکت آن، در برخورد شکل ۳-۱۱ برابر است با $\frac{\hbar q^2}{2k_F}$

۳-۶ دماهای فرمی زیر را تخمین بزنید:

(الف) ^3He مایع (چگالی $81\,kg\,m^{-3}$)، و

(ب) نوترونها در یک ستارهٔ نوترونی (چگالی $10^{17} kg m^{-3}$)

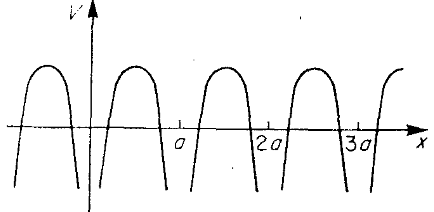
هر هنری زیبایی خود را دارد، ولی همه آن را نمی‌بینند.
کنفسیوس



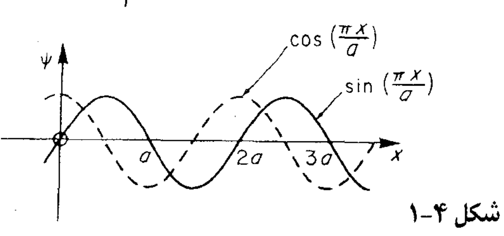
اثر پتانسیل دوره‌ای شبکه – نوارهای انرژی

۴–۱ نظریهٔ الکترون تقریباً آزاد

با وجود موفقیت نظریهٔ الکترون آزاد در توضیح بسیاری از خواص فلزات، این نظریه توضیح نمی‌دهد که چرا برخی مواد فلز و برخی عایق‌اند. همچنین تشریح نمی‌کند که چرا برخی از فلزات ضریب هال مثبت دارند، یعنی درون آنها ذرات باردار مثبت متحرکی حضور دارند. در اینجا در تلاشیم مدل الکترون آزاد را، با به حساب آوردن این واقعیت که یونهای مثبت، پتانسیل جاذبه‌ای یکنواختی تولید نمی‌کنند، بلکه در پتانسیل ناشی از آنها ستیغهای منفی قوی‌ای در شبکه وجود دارد، بهسازی کنیم. مثالی از یک چنین پتانسیلی برای زنجیر یک بعدی از اتمهای یکسان هم فاصله در شکل ۴–۱ (الف) نشان داده شده است؛ این پتانسیل دوره‌ای است با دوره‌ای برابر فاصله شبکهٔ a. توجه کنید که مبداء محور xرا منطبق بر مرکز یکی از اتمها گرفته‌ایم .



(الف) پتانسیل دوره‌ای یک بعدی مربوط به زنجیری از اتمهای یکسان.



(ب) امواج ساکن $sin\ (\pi x/a)$ و $cos\ (\pi x/a)$ با گره‌ها و شکمهایی در جایگاه‌های شبکه‌ای.

شکل ۴–۱

تصحیح در انرژی الکترون آزاد را با استفاده از فرمول متعارف نظریهٔ اختلال مرتبهٔ اول تخمین می‌زنیم.

$$\Delta\varepsilon = \frac{\int \psi^* V \psi \, dx}{\int \psi^* \psi \, dx} \tag{۱-۴}$$

که در آن V اختلاف بین پتانسیل واقعی و پتانسیل ثابتی است که در محاسبات مربوط به الکترون آزاد در نظر گرفته شد و ψ تابع موج **مختل** نشده است. پتانسیل شبکه را به صورت اختلال کوچکی روی پتانسیل الکترون آزاد در نظر می‌گیریم، این رهیافت به ***نظریهٔ الکترون تقریباً آزاد*** موسوم است. وارسی شکل ۴-۱ (الف) حاکی از آن است که این اختلال واقعاً آنقدر بزرگ است که در بهترین شرایط تنها می‌توانیم توقع داشته باشیم که نتایج حاصل از محاسبه نظریهٔ اختلال فقط از نظر کیفی درست باشند. ولی در بخش ۴-۳ اطمینان ما به جوابهای این نظریه افزایش خواهد یافت. در آن بخش با اتخاذ دیدگاهی کاملاً مخالف فرض می‌کنیم که حالت مختل نشده حالتی است که در آن الکترونها توسط پتانسیلهای اتمی قویاً به اتمها مقیدند و تغییر پتانسیل ناشی از حضور اتمهای همسایه را اختلال محسوب می‌کنیم و باز همین نتایج کیفی را به دست می‌آوریم. اگر پتانسیل آزاد را برابر مقدار میانگین پتانسیل واقعی بگیریم، در آن صورت اختلال V برای مثال یک بعدی مورد بحث را می‌توان به صورت سری فوریه به شکل زیر نوشت.

$$V = -\sum_{n=۱}^{\infty} V_n \cos\left(\frac{۲\pi n x}{a}\right) \tag{۲-۴}$$

که در آن انتظار داریم V_n ها، برای پتانسیلی با ستیغهای منفی قوی در جایگاه شبکه، مطابق شکل ۴-۱(الف)، اعدادی مثبت باشند. اگر از پتانسیل معادلهٔ(۴-۲) استفاده کنیم و تابع موج مختل نشده، را به صورت موج روندهٔ $\psi = e^{ikx}$ بگیریم، آنگاه چون $|\psi|^۲ = ۱$، معادلهٔ (۴-۱) به ازای همهٔ مقادیر k جواب بی‌معنای $\Delta\varepsilon = ۰$ را می‌دهد! ولی باید بیش از این دقت کنیم، زیرا حالتهای e^{ikx} و e^{-ikx} تبهگن هستند. در نظریهٔ اختلال مرتبه اول برای دو حالت مختل نشده تبهگن $\psi_۱$ و $\psi_۲$، توابع موج مناسب برای درج در معادلهٔ (۴-۱)دو ترکیب خطی **متعامد**، $\phi_۱$ و $\phi_۲$، از $\psi_۱$، $\psi_۲$ هستند که در معادلهٔ زیر صدق می‌کنند:

$$\int \phi_۱^* V \phi_۲ \, dx = ۰ \tag{۳-۴}$$

تنها ترکیبهای خطی متعامد e^{ikx} و e^{-ikx} که این شرط را، برای **تمام** مقادیر k، برآورده می‌کنند، $\cos(kx)$ و $\sin(kx)$ نیستند (مسئله ۴-۱ را ببینید)، با درج این توابع در معادلهٔ (۴-۱) در می‌یابیم که حال $\Delta\varepsilon$، برای مقادیر خاصی از k که به ازای آن چگالی

دوره‌ای بار وابسته به تابع موج، با دورهٔ شبکه مطابقت دارد متناهی است [شکل ۴-۱(الف)].

از این رو برای $\psi = sin\,(kx)$، اختلال را به صورت زیر محاسبه می‌کنیم.

$$\Delta\varepsilon = -\frac{\sum_{n=1}^{\infty} \int dx\ sin^2(kx)\, V_n\, cos\,(2\pi nx/a)}{\int dx\ sin^2\,(kx)}$$

$$= -\frac{\sum_{n=1}^{\infty} \int dx\ [1-cos\,(2kx)\, V_n\, cos\,(2\pi nx/a)}{\int dx\ [1-cos\,(2kx)]}$$

انتگرالده در صورت کسر حول صفر نوسان می‌کند و انتگرال روی تمام فضا صفر می‌شود، مگر آنکه دورهٔ $cos\,(2kx)$ بر دورهٔ یکی از ضرائب فوریهٔ $cos\,(2\pi nx/a)$ منطبق باشد، بنابراین $\Delta\varepsilon$ فقط در صورتی غیر صفر است که $k = n\pi/a$ باشد، که در آن صورت داریم

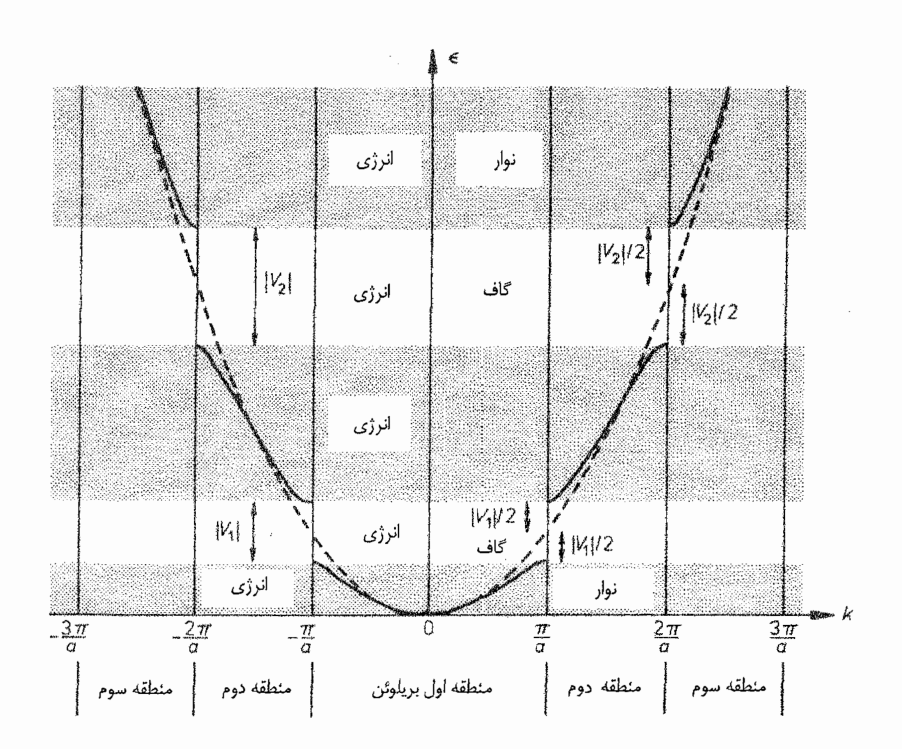
$$\Delta\varepsilon = \frac{\int dx\ V_n\ cos^2\ (2\pi\, nx/a)}{\int dx} = \frac{1}{2}\, V_n \qquad (۴-۴)$$

انتگرال سایر جملات نیز صفر می‌شود. همین طور، برای $\psi = cos\,(kx)$ و $k = n\pi/a$ در می‌یابیم که

$$\Delta\varepsilon = -\frac{1}{2}\ V_n \qquad (۵-۴)$$

دلیل فیزیکی این نتایج، برای حالت $n=1$، با وارسی شکل ۴-۱(الف) آشکار می‌شود: $\psi = sin\,(\pi x/a)$، در جایی که پتانسیل دافعه است، شکم دارد، به همین دلیل انرژی آن بالاتراست؛ $\psi = cos\,(\pi x/a)$، در جایی که پتانسیل جاذبه است، شکم دارد و لذا انرژی آن پایین‌تر است.

در شکل ۴-۲ این انرژیهای مختل نشده را در رابطه با سهمی الکترون آزاد $\varepsilon(k) = \hbar^2 k^2/2m$ نشان می‌دهیم. از آنجا که حالتهای پایای مربوط به $k = n\pi/a$، امواج ساکن هستند، نتیجه می‌شود که سرعت گروه و از آنجا $d\varepsilon/dk$ باید در این نقاط صفر باشند. برای محاسبهٔ سایر نقاط روی منحنی $\varepsilon(k)$ به رهیافتی متفاوت نیاز است (مسئلهٔ ۴-۳ را ببینید)، زیرا نتیجهٔ اختلال مرتبهٔ اول صفر است. ولی، با معلوم بودن ε و $d\varepsilon/dk$ در $k = n\pi/a$، می‌توان حدس زد که شکل کامل منحنی $\varepsilon(k)$ به صورتی است که با منحنی‌های کامل در شکل ۴-۲ نشان داده شده است؛ این حدس را محاسبه تأیید می‌کند. بنابراین پتانسیل شبکه این اثر فاحش را بر منحنی $\varepsilon(k)$ دارد که در آن ناحیه‌هایی از انرژی ایجاد می‌کند که فاقد هر حالت الکترونی‌اند؛ این نواحی، که به **گافهای نواری** یا **گافهای انرژی** موسومند، در شکل



شکل ۴-۲ : منحنیهای کامل، اثر پتانسیل شبکهٔ دوره‌ای را روی رابطهٔ پاشندگی سهموی الکترون آزاد (منحنی خط چین) نشان می‌دهد. نوارهای ترازهای انرژی مجاز با سایه نمایش داده شده‌اند. انحراف انرژی از مقادیر مربوط به الکترون آزاد، روی مرزهای مناطق بریلوئن با معادلات (۴-۴) و (۴-۵) بیان می‌شوند.

۴-۲ نشان داده شده‌اند. آن نواحی از ε که حاوی حالتها هستند **نوارهای انرژی** خوانده می‌شوند و این نوارها نیز در همان شکل نشان داده شده‌اند. گروه‌بندی انرژیهای الکترونی به نوارها تأثیر مهمی بر رفتار الکترونها در جامدات دارد. این موضوع در بقیهٔ قسمتهای کتاب، بر خواننده آشکار خواهد شد.

از شکل ۴-۲ هم چنین دیده می‌شود که محور k نیز به طور طبیعی تحت اثر پتانسیل شبکهٔ دوره‌ای روی حالتهای الکترونی، به تعدادی از نواحی تجزیه می‌شود؛ این نواحی به **مناطق بریلوئن** موسومند. به این ترتیب در مثال یک بعدی مورد بحث، ناحیهٔ $|k| < \pi/a$ (شکل ۴-۲ را ببینید) اولین منطقهٔ بریلوئن و حالتهای با مقادیر k واقع در این گستره در پایین‌ترین نوار انرژی قرار می‌گیرند. دو ناحیه با $\pi/a < |k| < ۲\pi/a$ دومین منطقهٔ بریلوئن هستند و حالتهای این منطقه در پایین‌ترین نوار انرژی بعدی قرار دارند.

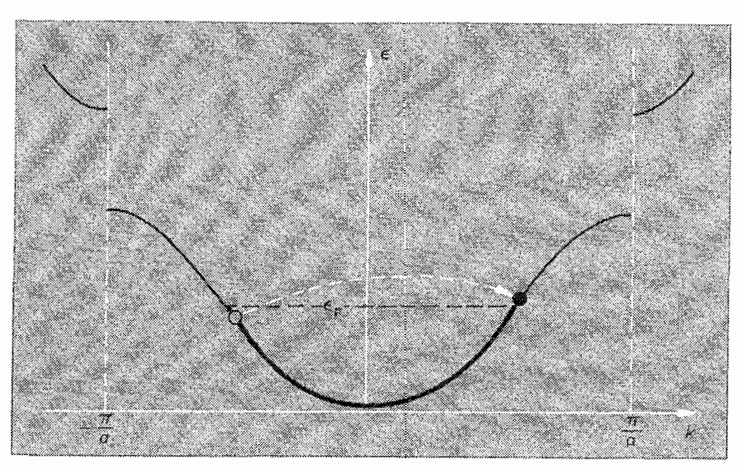
خوانندهٔ هوشیار ممکن است به این نکته توجه کرده باشد که مرزهای اولین منطقهٔ بریلوئن که در آن اولین گاف انرژی پدیدار می‌شود و سرعت گروه الکترون در آنجا صفر می‌شود، دقیقاً در همان مقادیر k برابر $\pm\pi/a$ قرار می‌گیرند، که در آنها سرعت گروه امواج ارتعاشی شبکهٔ زنجیر یک بعدی، $d\varepsilon/dk$، صفر می‌شوند (شکل ۲-۴ را ببینید). همان گونه که در فصل ۲ اشاره کردیم، حرکتهای موجی با این مقادیر k، قانون براگ برای پراش به وسیلهٔ شبکهٔ یک بعدی، را برآورده می‌کنند [معادلهٔ (۱-۳)]. وارسی معادلهٔ (۲-۱۲) نشان می‌دهد که شرط پراش براگ، در واقع، تمام مقادیر kای را، که در آنها گافهای انرژی در منحنی $\varepsilon(k)$ ظاهر می‌شوند، تولید می‌کند. تداخل موج دوندهٔ فرودی با موج پراشیدهٔ حاصل منجر به ایجاد موج ساکن، دراین مقادیر k، و در نتیجه باعث صفر شدن سرعت گروه می‌شود. در فصل ۱۱ فرمولبندی زیبایی را معرفی می‌کنیم که تعمیم این ایده‌ها را به بلورهایی با ساختار اختیاری میسر می‌سازد.

۴-۲ دسته بندی جامدات بلورین به فلزات، عایقها و نیمرساناها

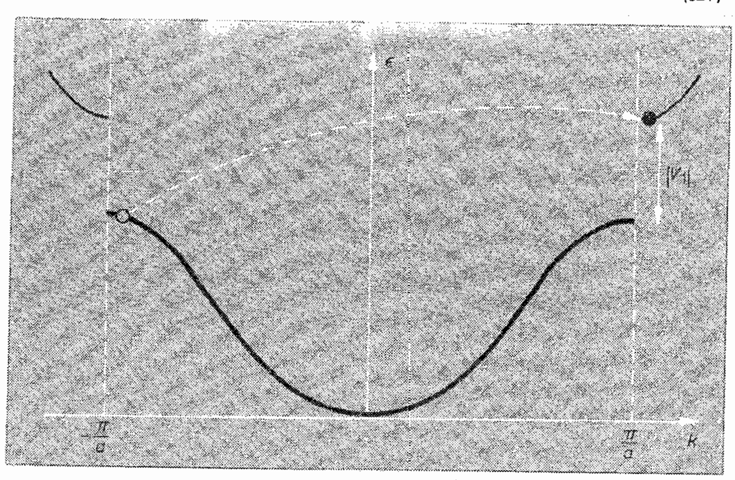
حال بررسی می‌کنیم که چگونه اشغال حالتهای الکترونی در فضای k، تحت تأثیر تغییرات در رابطهٔ $\varepsilon(k)$، که در بخش قبل مطرح شد، قرار می‌گیرد. اگر شرایط مرزی دوره‌ای را به کار بریم، مقادیر مجاز k برای حالتهای الکترونی، در یک بلور یک بعدی، دقیقاً همان مقادیر مربوط به امواج شبکه هستند [معادلهٔ (۲-۱۱)]. از این رو $k=2\pi p/L$، که در آن p عددی است صحیح و $L=Na$ طول زنجیر، و N تعداد ***اتمهای*** موجود در زنجیر است. بنابراین، همانند مسئلهٔ ارتعاش شبکه، N مقدار مجاز برای k، در گسترهٔ $-\pi/a<k<\pi/a$ وجود دارد، به طوری که اولین منطقهٔ بریلوئن و بنابراین پایین‌ترین نوار انرژی شکل ۴-۲ دقیقاً حاوی N حالت k است و می‌تواند $2N$ الکترون جای دهد.

حالت پایهٔ الکترونی برای اتمهای یک ظرفیتی متناظر است با وضعیتی که در آن، همان گونه که در شکل ۴-۳(الف) نشان داده شد حالتهای با انرژی فرمی ε_F در پایین‌ترین نوار انرژی پر هستند. دقیقاً آنقدر الکترون وجود دارد تا حالتهای موجود در این نوار را تا نیمه پرکنند؛ یعنی منطقه اول بریلوئن به وسیله یک الکترون به ازای هر اتم تا نیمه پر می‌شود. به دلیل وجود حالتهای تهی انرژی درست در مجاورت این حالتهای اشغال شده، امکان ساختن یک حالت حامل جریان الکتریکی، به وسیله انتقال کامل توزیع الکترونی در فضای k، به صورتی که در شکل ۴-۳(الف) نشان داده شده است، موجود است، مانند مورد الکترونهای آزاد [به شکل۳-۸(ب) رجوع کنید]؛ بنابراین در این وضعیت انتظار رفتار فلزی را داریم. در واقع، از آنجا که رابطهٔ $\varepsilon(k)$ در مجاورت انرژی فرمی شبیه رابطهٔ متناظر برای الکترونهای آزاد است، می‌توانیم انتظار داشته باشیم که نظریهٔ الکترون آزاد در مورد فلزات یک ظرفیتی یک بعدی کارایی خوبی داشته باشد.

از طرف دیگر، اگر اتمها دو ظرفیتی باشند، در آن صورت آنقدر الکترون وجود دارد تا منطقه



(الف)



(ب)

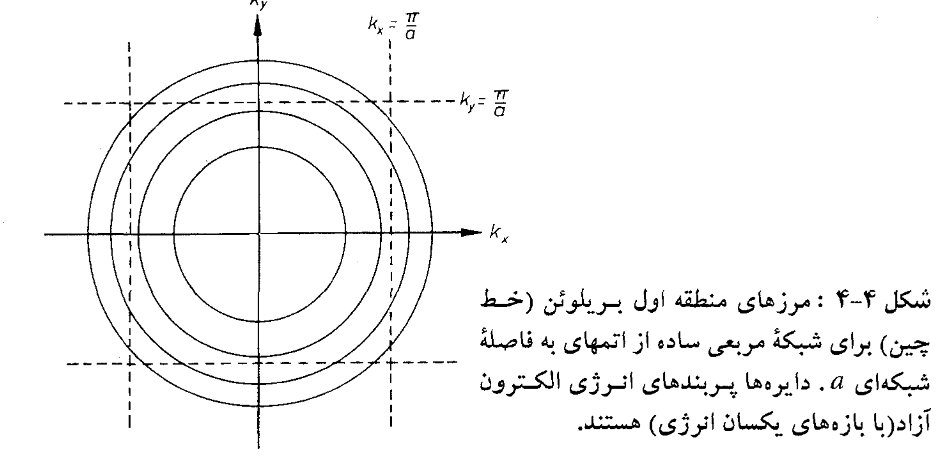
شکل ۴-۳: (الف) حالتهای اشغال شده، برای زنجیر یک بعدی از اتمهای یک ظرفیتی با قسمت پر رنگ منحنی $\varepsilon(k)$ نمایش داده شده‌اند. مطابق شکل، انتقال الکترونها تمامی توزیع الکترون را در فضای k جابه جا و یک حالت حامل جریان تولید می‌کند. (ب) برای یک زنجیر یک بعدی از اتمهای دو ظرفیتی، همهٔ حالتهای منطقهٔ اول بریلوئن پراند. برای تولید یک حالت حامل جریان باید تعدادی از الکترونها، مطابق شکل، به حالتهای منطقهٔ دوم بریلوئن، یعنی به نوار انرژی بالاتر، ارتقا یابند.

اول بریلوئن دقیقاً پر شود. به دلیل وجود گافهای انرژی در $k=\pm\pi/a$، حالت حامل جریان را تنها می‌توان با صرف مقداری متناهی از انرژی چون V_1 تولید کرد تا هر الکترون به حالتی با

مقادیر k بزرگتر از π/a انتقال یابد [شکل ۴-۳(ب)]. چون این انرژی در یک میدان الکتریکی dc موجود نیست، چنین ماده‌ای در صفر مطلق، عایق است. در دمایی متناهی، اگر V_1 به قدر کافی کوچک باشد، انتظار داریم برخی الکترونها به طور گرمایی به منطقهٔ دوم بریلوئن برانگیخته شوند؛ در فصل ۵ خواهیم دید که این امر به رفتار نیمرسانایی منجر می‌شود. برای مقادیر بزرگتر V_1 رفتار ماده، در دماهای متناهی، کماکان رفتار یک عایق خواهد بود.

در مورد اتمهای سه ظرفیتی، منطقهٔ ***اول*** بریلوئن پر و منطقه **دوم** بریلوئن نیمه پر است؛ از این رو انتظار داریم الکترونهای موجود در منطقه دوم باز هم رفتار فلزی داشته باشند. به طور کلی، رفتار فلزی را از اتمهای با ظرفیت فرد و رفتار عایق یا نیمرسانایی را از اتمهای با ظرفیت زوج انتظار داریم. در واقع، این تعداد الکترونهای ظرفیت به ازای یاختهٔ یکهٔ بسیط است که حائز اهمیت است نه تعداد الکترونهای هر اتم. این به این خاطر است که موقعیت مرزهای منطقهٔ بریلوئن به وسیلهٔ دوره‌ای بودن پتانسیل شبکه و در نتیجه به وسیله اندازهٔ یاخته یکهٔ بسیط تعیین می‌شود. تعداد حالتهای k در منطقهٔ اول بریلوئن همواره با تعداد یاخته‌های یکهٔ بسیط موجود در بلوار برابراست. در اتمهای با ظرفیت زوج همیشه تعداد زوجی از الکترونهای ظرفیت در هر یاختهٔ بسیط موجود است که براساس استدلال فوق این اتمها همواره بلورهای عایق را درست می‌کنند.

مشکل این تصویر زیبا و ساده آن است که فلزات دو ظرفیتی در واقع وجود دارند: برای مثال قلیاییهای خاکی Ca، Sr، Ba. وجود فلزات دو ظرفیتی نتیجه‌گیری بالا را نقض نمی‌کنند، زیرا استدلالی که ارائه شد فقط در مورد بلورهای یک بعدی به‌کار می‌رود. برای توجیه وجود فلزات دو ظرفیتی باید ایدهٔ نوارهای انرژی را به بلورهای بیش از یک بعدی تعمیم داد. برای این کار کافی است ساده‌ترین بلور دوبعدی ممکن را بررسی کنیم: بلوری مربعی باابعاد $L\times L$ که حاوی شبکه‌ای مربعی ساده از اتمهای یکسان به فاصله شبکه‌ای a است. برای سادگی توجه خود را به گافهای انرژی حاصل از مؤلفهٔ اول سری فوریهٔ پتانسیل شبکه‌ای V_1 معطوف خواهیم کرد. گافهای انرژی وقتی پیش می‌آیند که امواج الکترونی با دورهٔ شبکه همگامی داشته باشند. این همگامی با دورهٔ بنیادی در راستای x وقتی وجود خواهد داشت که $k_x=\pm\pi/a$ و با دورهٔ در راستای y وقتی همگامی وجود خواهد داشت که $k_y=\pm\pi/a$. بنابراین، مرزهای منطقهٔ اول بریلوئن در فضای k ی دو بعدی، مطابق شکل ۴-۴، عبارتند از خطوط $k_x=\pm\pi/a$ و $k_y=\pm\pi/a$. انرژیهای الکترونی را می‌توان، با استفاده از خطوط پربندی با انرژی ثابت به صورت تابعی از k_x و k_y، روی همان شکل نمایش داد. دایره‌های هم مرکز نشان داده شده در شکل خطوط پربندی متناظر بانظریهٔ الکترون آزاد، $\varepsilon=\hbar^2k^2/2m=\hbar^2(k_x^2+k_y^2)/2m$، هستند.



شکل ۴-۴ : مرزهای منطقه اول بریلوئن (خط چین) برای شبکهٔ مربعی ساده از اتمهای به فاصلهٔ شبکه‌ای a. دایره‌ها پربندهای انرژی الکترون آزاد(با بازه‌های یکسان انرژی) هستند.

برای دستیابی به چگونگی مختل شدن این پربندهای انرژی به وسیلهٔ پتانسیل شبکه، در شکل ۴-۴ توجه می‌کنیم که انرژی درون منطقهٔ درست در مجاورت مرز منطقه کمتر از انرژی الکترون آزاد می‌شود و این موجب حرکت برونگرای پربندهای انرژی به سوی مرز می‌شود. انرژی افزایش یافته در خارج از مرز منطقه نیز موجب حرکت دورنگرای پربند انرژی ثابت به سوی مرز می‌شود. بنابراین مرزهای منطقه پربندهای انرژی را "جذب" می‌کنند، پر بند انرژی مختل شده در شکل ۴-۵ (الف) نشان داده شده‌است. پربند مختل شده مرزهای منطقه را تحت زاویهٔ قائم قطع می‌کند. به این دلیل که مؤلفهٔ سرعت گروه الکترون

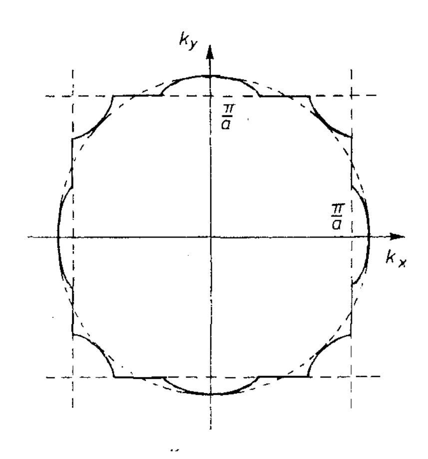
$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon}{dk}$$

بر مرز عمود است صفر می‌شود؛ بنابراین **شیب** ε در فضای $\mathbf{k}$ ***موازی*** با مرز و پربند با ε ی ثابت **عمود** بر مرز است. صفر شدن مؤلفهٔ عمود بر مرز ***سرعت گروه*** دارای همان تعبیرفیزیکی به زبان امواج ساکن حاصل از پراش براگ همانند مورد بلور یک بعدی است (مسئلهٔ ۴-۲ را ببینید).

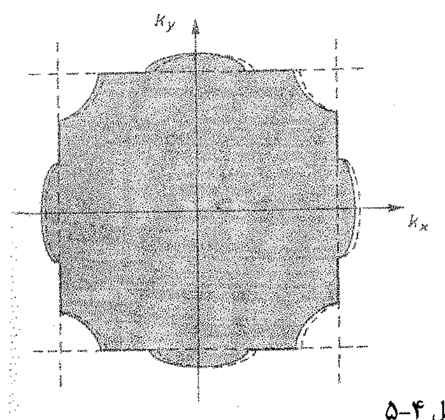
مساحت منطقهٔ اول بریلوئن $(2\pi/a)^2$ و چگالی حالتهای موج متحرک در فضای $\mathbf{k}$ عبارت است از

$$\rho_R(\mathbf{k}) = \mathbf{L}^2/(2\pi)^2 \qquad (۴-۶)$$

این هم ارز دو بعدی چگالیهای یک بعدی و سه بعدی حالتها برای امواج متحرک است که، به ترتیب، با معادلات (۲-۳۰) و (۲-۴۱) بیان شده‌اند. از این رو منطقه اول بریلوئن شامل $\rho_R(\mathbf{k})(2\pi/a)^2 = (L/a)^2 = N$ حالت $\mathbf{k}$ است، که در آن N تعداد اتمها در بلور است؛ این دقیقاً همان نتیجهٔ مورد یک بعدی است و در حالت سه بعدی نیز از اعتبار برخوردار است.



(الف) اختلال (منحنی‌های پر) پربند انرژی الکترون آزاد (دایرهٔ خط چین) به وسیلهٔ یک پتانسیل شبکه‌ای دوره‌ای.



(ب) قسمت های سایه زده شده حالتهای اشغال شده در $T=0$ برای یک فلز دو ظرفیتی دو بعدی را نشان می‌دهد. جابه‌جایی توزیع الکترونی در فضای k، برای حصول یک حالت حامل جریان، با منحنی‌های، خط چین نمایش شده است.

شکل ۴-۵

بنابراین در منطقهٔ اول بریلوئن دقیقاً $2N$ الکترون می توان جای داد.

برای تعیین اینکه، برای شبکه‌ای از اتمهای دو ظرفیتی، کدام حالتها عملاً اشغال شده‌اند، باید دو شرط زیر برآورده‌شوند:

(الف) باید مساحتی از فضای $\mathbf{k}$ برابر با مساحت منطقهٔ اول پر شده باشد،

(ب) باید تمامی ترازهای انرژی پایین‌تر از یک مقدار معین ε_F پر شده باشد.

این شرایط در صورتی برآورده می شوند که الکترونها مساحت سایه‌زده شده‌ای از فضای k را، که در شکل ۴-۵(ب) نشان داده شده‌است، پر کنند. مرز بین حالتهای اشغال شده و اشغال نشده کماکان سطح فرمی نامیده می‌شود، هر چند شکل آن، با دایرهٔ الکترون آزاد تفاوت بسیار دارد. ولی سطح فرمی شکل ۴-۵ (الف) مقداری "مساحت" آزاد دارد و همان گونه که با منحنی‌های خط چین نشان داده شده‌است، می‌توان آن را اندکی جابه جا کرد تا یک حالت حامل

جریان به دست آید. به این ترتیب یک فلز دو ظرفیتی دو بعدی داریم.

دلیل این رفتار آن است که برای یک الکترون آزاد (شکل ۴-۴)، انرژی در یک گوشهٔ منطقه دو برابر انرژی در وسط لبهٔ منطقه است، زیرا $|\mathbf{k}|$ در آنجا به اندازهٔ $\sqrt{2}$ برابر بزرگتر است. بنابراین، اگر اختلال ناشی از پتانسیل شبکه‌ای کوچک باشد، پایین‌ترین حالتهای انرژی در دومین منطقه پایین‌تر از بالاترین حالتها در منطقهٔ اول هستند، و مطابق آنچه که در شکل ۴-۵ نشان داده شده است ، **نوارهای انرژی همپوشان** داریم. با افزایش اختلال و درنتیجه افزایش گاف انرژی وابسته به آن به وضعیتی می‌رسیم که این نوارها دیگر همپوشانی ندارند؛ یعنی همهٔ حالتها در منطقهٔ اول انرژی کمتری از هر حالت در دومین منطقه دارند. در مورد اتمهای دو ظرفیتی، منطقهٔ اول تماماً اشغال شده و منطقهٔ دوم کاملاً تهی است. در این صورت ناحیهٔ اشغال شده در فضای $\mathbf{k}$ ، کاملاً به وسیلهٔ مرزهای منطقهٔ اول بریلوئن محصور می‌شود و هیچ مساحت آزادی در سطح فرمی وجود ندارد. در این شرایط برای ایجاد یک حالت حامل جریان باید به الکترونها مقداری متناهی انرژی داد و لذا با یک عایق سروکار داریم.

این که یک نوار انرژی از الکترون رسانای جریان الکتریکی پر نیست و در نتیجه حامل هیچ بار متحرکی نیست، پیامدی بسیار عجیب دارد. اگر تعدادی از الکترونها از چنین نواری دور شوند تا بسته‌هایی از حالتهای تهی، از قبیل حالتهای مربوط به گوشه‌های منطقهٔ بریلوئن در شکل ۴-۵ (ب) را تولید کنند، در آن صورت دور کردن بار منفی مانند افزودن بار مثبت به نظر می‌رسد، و حالتهای تهی نظیر ذرات با بار $e+$ رسانای جریان الکتریکی می‌شوند. این" حاملها" به **حفره** موسومند و مسئولیت ضرائب مثبت هال برای تعدادی از فلزات دو ظرفیتی را بر عهده دارند. در فصل بعد به تفصیل دربارهٔ خواص حفره‌ها بحث می‌کنیم.

وضعیت در بلور سه بعدی بسیار شبیه به وضعیت در دو بعد است؛ در فصل ۱۱ روش عام تعیین موقعیت مرزهای منطقهٔ بریلوئن را در فضای سه بعدی $\mathbf{k}$ ، برای یک ساختار بلوری دلخواه، عرضه خواهیم کرد.نتایج مهم این فصل عبارتند از:

(الف) تعداد فرد الکترونهای ظرفیتی در یک یاختهٔ یکهٔ بسیط، به رفتار فلزی منجر می‌شود؛

(ب) تعداد زوج الکترونهای ظرفیتی به ازای یاختهٔ یکهٔ بسیط، اگر همپوشانی نواری موجود باشد رفتار فلزی و اگر گاف نواری کوچکی وجود داشته باشد رفتار نیمرسانایی (فصل ۵ را ببینید) و اگر گاف نواری بزرگی موجود باشد رفتار عایق را ارائه می‌کند.

به این کشف بسیار مهم، که در این بخش به آن دست یافتیم، توجه کنید که غیاب رسانش در یک جامد حاکی از آن نیست که الکترونها در اتم جایگزیده‌اند. همهٔ توابع موجی، که در این فصل مورد بحث قرار دادیم، در سرتاسر بلور گسترش دارند.

۴-۳ رهیافت تنگ بست (بستگی قوی)

اگر چه نظریهٔ الکترون تقریباً آزاد جوابی برای این مسئله فراهم کرده است که چرا برخی از بلورها رسانای الکتریسیته و برخی عایق‌اند، ولی بینش چندانی بر طبیعت توابع موج الکترون ارائه نکرده است. برای مثال، این نظریه، مدل مناسبی برای توصیف پیوند کووالان بین الکترونهای ظرفیتی در بلورهای نیمرساناهای مهم، سیلیسیم و ژرمانیوم، نیست. رهیافت تنگ بست بینشی را که نیاز داریم در اختیار می‌گذارد و در عین حال پیشگویی‌های کیفی نظریهٔ الکترون تقریباً آزاد را نیز تأیید می‌کند. رهیافت تنگ بست از این نظر که شالودهٔ بسیاری از روشهای خیلی پیشرفته‌تر محاسبات نواری انرژی در جامدات است نیز دارای اهمیت است.

۴-۳-۱ دامنه‌های جفتیدهٔ احتمال

برای معرفی روش تنگ بست باز هم ساده‌ترین بلور ممکن یعنی زنجیر یک بعدی از اتمهای یکسان و به فاصلهٔ a را به کار می‌بریم. دو سر این زنجیر طوری به هم متصل شده‌اند که شرایط مرزی دوره‌ای برای آنها مناسب است. اگر فاصله اتمها از هم زیاد باشد، ویژه توابع الکترونهای ظرفیتی همان ویژه توابع مربوط به اتمهای منزوی‌اند. تابع موج حالت اتمی مناسب در اتم nام را با ϕ_n نمایش می‌دهیم؛ برای مثال، این حالت برای اتمهای سدیم، حالت $3s$ است. با کاهش فاصلهٔ بین اتمها، می توان انتظار داشت که در یک مرحله الکترونها شروع به حرکت از یک اتم به اتم دیگر کنند. به شرط آن که اتمها خیلی به هم نزدیک نباشند، این حرکت را می‌توان به منزلهٔ انتقال الکترون از حالت ϕ_n به همان حالت در یک اتم همسایه، ϕ_{n-1} یا ϕ_{n+1}، تلقی کرد. این تصویر، پیشنهاد می‌کند که ممکن است تابع موج الکترون را با تقریبی مناسب، بتوان به صورت ترکیب خطی از حالتهای ϕ_n روی N اتم موجود در زنجیر نوشت. به این ترتیب

$$\psi = \sum_{n=1}^{N} a_n(t)\,\phi_n \qquad (۴-۷)$$

استفاده از معادلهٔ وابسته به زمان شرودینگر برای محاسبهٔ ψ کاری است بس مشکل. استفاده از فرمولبندی دیگر مکانیک کوانتومی، که به طور مستقیم احتمال $|c_n(t)|^2$ یافتن الکترون در حالت ϕ_n در لحظهٔ t را به دست می‌دهد، هم ساده‌تر است و هم از نظر فیزیکی با معناتر، توجه کنید که، چون حالتهای اتمی مربوط به اتمهای مختلف متعامد نیستند، دامنهٔ احتمال $c_n(t)$ با ضرایب $a_n(t)$ در معادلهٔ (۴-۷) برابر نیست؛ ولی، می‌خواهیم حالتهای مانای دستگاه[1] را بیابیم و برای این منظور وابستگی‌های زمانی $a_n(t)$ و $c_n(t)$ یکی هستند،

۱- برای حالتهای مانا، $|C_n(t)|^2$ احتمال یافتن الکترونی بر اتم nام مستقل از زمان است.

یعنی، برای تمام مقادیر n داریم

$$a_n \sim c_n \sim exp(-Et/\hbar) \qquad (۸-۴)$$

که در آن E انرژی حالت است. اثبات صوری این فرمولبندی متفاوت مکانیک کوانتومی در پیوست (الف) آمده است که منجر به مجموعهٔ N معادله جفت شدهٔ زیر (یک معادله برای هر اتم موجود در زنجیر) برای دامنه‌های احتمال c_n می‌شود:

$$i\hbar \frac{dc_n}{dt} = Bc_n - Ac_{n-1} - Ac_{n+1} \qquad (۹-۴)$$

می‌توانیم تعبیر فیزیکی ساده‌ای برای جملات Ac_{n-1} و Ac_{n+1} ارائه کنیم. این جمله‌ها نشانگر تغییرات در c_n (و در نتیجه تغییرات در احتمال بودن الکترون بر n امین اتم) ناشی از انتقال الکترون به، یا از اتمهای همسایه است. بنابراین پارامتر A مقیاسی است از شدت جفتیدگی بین حالتهای اتمهای همسایه. در نوشتن معادلات (۴-۹)، از احتمال انتقال ممکن الکترون بین همسایه‌های درجهٔ دوم چشم پوشی شده است. آموزنده است که نخست به بررسی موردی بپردازیم که در آن اتمها دور از هم‌اند، در این صورت می‌توانیم از جفتیدگی بین همسایه‌هاکه با پارامتر A نمایش داده می‌شود، صرفنظر کنیم. در نتیجه معادلات (۴-۹) به Nمعادلهٔ جفت نشده تبدیل می‌شوند

$$i\hbar \frac{dc_n}{dt} = Bc_n \qquad (۱۰-۴)$$

جواب این معادله به شرح زیراست

$$c_n(t) = c_n(۰)\, e^{-iBt/\hbar} \qquad (۱۱-۴)$$

اگر فرض کنیم که یک الکترون به طور قطع، در لحظهٔ $t=۰$ در حالت ϕی اتم m ام است، آنگاه داریم

$$c_n(۰) = \begin{cases} ۱ & , \; n=m \\ ۰ & \text{در غیر این صورت} \end{cases} \qquad (۱۲-۴)$$

به گونه‌ای که در زمان t تابع موج به صورت $\psi = \phi_m \; exp(-iBt/\hbar)$ است، در نتیجه تأیید می‌شود که الکترون در همان حالت ϕی اتم mام باقی می‌ماند و پارامتر B، در این حالت حدی، برابر انرژی این حالت ϕ است.

پیش از به کارگیری معادلات (۴-۹) در مورد زنجیر یک بعدی اندکی از موضوع منحرف می‌شویم و در بخش ۴-۳-۲ نشان می‌دهیم که این معادلات وقتی در مورد ساده‌ترین مولکول ممکن با پیوند کووالان، یعنی $H_۲^+$ اعمال شوند، قادرانـد پیوند کووالان را توصیف کنند. خوانندهٔ مشتاق رسیدن به جواب مربوط به زنجیر می‌تواند بخش بعدی را در اولین دور مطالعه

کنار بگذارد، ولی توصیه می‌شود در نهایت این بخش را مطالعه کند، زیرا زنجیری حاوی دو اتم، نقطهٔ درونیابی مفید و با ثمری بین اتم و یک بلور ماکروسکوپی فراهم سازد.

۴-۳-۲ یون H_2^+ - پیوند کووالان

یون H_2^+ دو پروتون دارد که به وسیلهٔ یک الکترون به هم مقیداند. با به کار بردن معادلات (۴-۹) برای زنجیر حاوی دو پروتون (که با ۱و ۲ برچسب زده می‌شوند)، داریم[1]

$$i\hbar \frac{dc_1}{dt} = Bc_1 - Ac_2$$

(۴-۱۳)

$$i\hbar \frac{dc_2}{dt} = Bc_2 - Ac_1$$

B و A توابعی از فاصلهٔ بین پروتونها هستند. محاسبهٔ این انرژیها به مکانیک کوانتومی مفصلتری نیاز دارد. انتخاب علامت منفی در جلوی A باعث می‌شود A کمیت مثبتی بشود (مطالب زیر را ملاحظه کنید).

حال باید در جستجوی یافتن جوابهای حالت مانای معادلات (۴-۱۳) باشیم؛ این جوابها باید دارای خاصیت مندرج در معادله (۴-۸) باشند. این جوابها به سادگی با توجه به این نکته به دست می‌آیند که معادلات (۴-۱۳) تقریباً مشابه معادلات نوسانگر جفتیده هستند که مثلاً برای دو آونگ یکسان جفتیده حاصل می‌شوند؛ اختلاف عمده در آن است که عملگر دیفرانسیلی به جای d^2/dt^2 به صورت id/dt است. یافتن جوابهایی به شکل معادلهٔ (۴-۸) هم ارز است با تعیین مدهای بهنجار آونگهای جفتیده، و یک شگرد را در هر دو مورد می‌توان به کار برد. یعنی می‌توان از مجموع و تفاضل معادلات (۴-۱۳) دو معادلهٔ ناجفتیده، برای متغیرهای جدید $c_+ = c_1 + c_2$ و $c_- = c_1 - c_2$ به دست آورد: این معادلات ناجفتیده به قرار زیراند.

$$i\hbar \frac{dc_+}{dt} = (B - A)c_+$$

(۴-۱۴)

$$i\hbar \frac{dc_-}{dt} = (B + A)c_-$$

با جوابهای حالت مانای $c_+ \propto exp[-i(B-A)t/\hbar]$ و $c_- \propto exp[-i(B+A)t/\hbar]$

برای یافتن توابع موج متناظر باید مقادیر $a_1(t)$ و $a_2(t)$ در معادلهٔ (۴-۷) را تعیین کنیم؛ نخست توجه می‌کنیم که اگر الکترون به طور قطع در حالت نمایش داده شده با c_+ باشد، در

۱- توجه کنید که متصل کردن دو انتهای زنجیر به هم و ساختن یک حلقه، در این مورد جایز نیست.

آن صورت $c_- = 0$ و در نتیجه $c_1 = c_2$. به دلیل اینکه ϕ_1 و ϕ_2 توابع یکسانی هستند که در نقاط متفاوت متمرکز شده‌اند، معادلهٔ (الف ۳) از پیوست (الف) نشان می‌دهد که اگر $c_1 = c_2$ آنگاه $a_1 = a_2$ و از این رو تابع موج متناظر با c_+ به صورت

$$\Psi_+ \propto [\phi_1 + \phi_2] exp[-i(B - A)t/\hbar] \qquad (۱۵-۴)$$

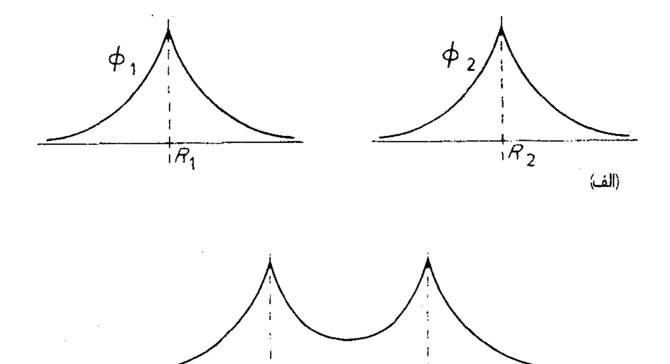
و با انرژی $E_+ = B - A$ است. همین‌طور تابع موج متناظر با C_- به صورت

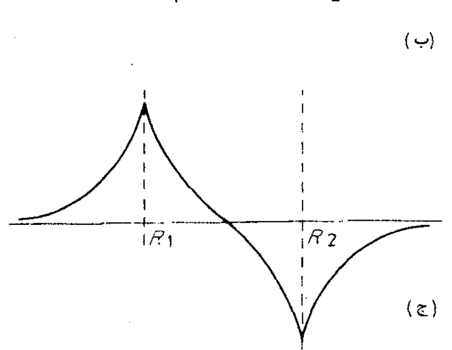
$$\Psi_- \propto [\phi_1 + \phi_2] exp[-i(B + A)t/\hbar] \qquad (۱۶-۴)$$

و با انرژی $E_- = B + A$ است. حالت ϕ برای اتمهای هیدروژن حالت $1s$ است که در شکل ۴-۶(الف) برای دو اتم منزوی نشان داده شده است. تغییرات توابع موج Ψ_+ و Ψ_- در راستای خط بین هسته‌ای، به ترتیب، در شکلهای ۴-۶(الف) و ۴-۶ (ج) رسم شده‌اند.

دانستن این توابع موج مارا قادر به تعیین علامت A و به کمک آن تعیین اینکه کدام حالت انرژی کمتری دارد، می‌سازد. انرژی الکترون شامل دو سهم است: انرژی پتانسیل الکترواستاتیکی الکترون واقع در میدان ناشی از دو پروتون و انرژی جنبشی متناسب با $|\nabla\Psi|^2$. مقایسهٔ شکلهای ۴-۶ (ب)، و (ج) نشان می‌دهد که هر دوی این سهم‌ها، در حالت متقارن $\phi_1 + \phi_2$ شکل ۴-۶(ب)، پایین‌تراند؛ انرژی پتانسیل به این دلیل پایین است که در ناحیه‌ای ، که در آن الکترونها پتانسیل جاذبهٔ ناشی از هر دو پروتون را «تجربه » می‌کنند، بزرگ است و انرژی جنبشی به این دلیل پایین است که $|\nabla\Psi|^2$ بین هسته‌ها کمتر و در سایر نقاط تقریباً یکسان است. از این رو انرژی A مثبت است.

توابع موجی که به دست می‌آوریم دقیق نیستند زیرا حالتهای برانگیختهٔ اتمی در معادله (۴-۷) را منظور نکرده‌ایم. ولی با وجود این، می‌توانیم برای حالت حدی، که در فاصلهٔ R بین پروتونها به صفر می‌گراید و در نتیجه پتانسیل هسته‌ای به پتانسیل مربوط به اتم هلیم تبدیل می‌شود، انرژیهای دقیقی به دست آوریم. در این فرایند باید توابع موج به همواری، به حالتهای یون He^+ تبدیل شوند. حالت متقارن در شکل ۴-۶ (ب)، همانند یک حالت $1s$ اتمی، بی‌گره است؛ بنابراین انتظار داریم که این حالت، حالت $1s$ یون He^+ با انرژی برابر ۴- ریدبرگ بشود. (یک ریدبرگ انرژی همبستگی پایه اتم هیدروژن، یعنی $13/6\ eV$ است). از طرف دیگر، حالت پاد متقارن در شکل ۴-۶ (ج) یک تک صفحهٔ گره‌ای عمود بر خط بین هسته‌ای دارد. این تقارن در حالت $2p$ اتمی موجود است، از این رو از این رو توقع داریم، درحد $R \to 0$ ، به حالت $2p$ ی یون He^+ ، با انرژی برابر ۱- ریدبرگ دست یابیم. در حد دیگر $R \to \infty$ ، هر دو حالت، به حالت پایهٔ هیدروژن اتمی با انرژی برابر ۱- ریدبرگ میل خواهد کرد.

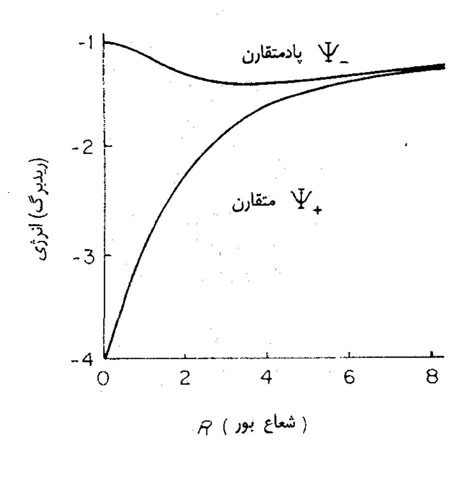


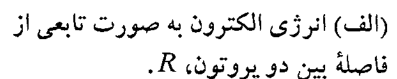


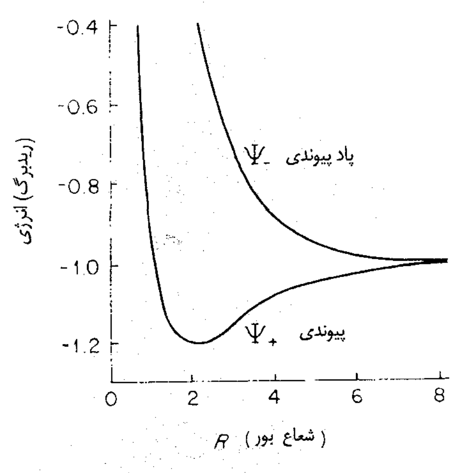
شکل ۴-۶ : (الف) توابع موج $1s$ روی دو اتم منزوی. (ب) تابع موج متقارن $(\phi_۱ + \phi_۲)$. (ج) تابع موج پاد متقارن $(\phi_۱ - \phi_۲)$.

با توجه به شکل ۴-۷ (الف) که به نظر می‌رسد نتایج محاسبات دقیق انرژیهای دو حالت را به صورت تابعی از R نشان می‌دهد، این انرژیها حدی درست است، شکل ۴-۷ (الف) انرژی الکترونی تنها را نشان می‌دهد. برای دستیابی به انرژی کل باید دافعهٔ کولنی بین هسته‌ای $e^۲/۴\pi\varepsilon_\circ R$ را به آن بیفزاییم تا به منحنی‌های انرژی بین هسته‌ای شکل ۴-۷ (ب) برسیم. می‌بینیم که تنها ترکیب متقارنΨ_+ است که کمینه‌ای در این منحنی پتانسیل دارد و پیوند کووالان را نمایش می‌دهد. به همین دلیل تابع موج متقارن را **اوربیتال پیوندی** و تابع موج پاد متقارن را **اوربیتال پادپیوندی** می‌خوانند. تابع موج به شکل معادلهٔ (۴-۱۵)، که پیوندی کووالان را توصیف می‌کند، به عنوان **ترکیبی خطی از اوربیتالهای اتمی** اتلاق می‌شود. شکل ۴-۷ یک ساختار نواری ناقص را نشان می‌دهد؛ تبهگنی حالتهای دواتم منزوی، با نزدیک شدن دو هستهٔ اتم به یکدیگر، از بین رفته است؛ تعداد ترازهای موجود در «نوار» حاصل با تعداد هسته‌های موجود در مولکول برابر است.

همبستگی دو پروتون اساس پیوند کووالانی، یعنی کاهش انرژی در اثر متمرکز شدن الکترونها در مجاورت خط بین هسته‌ای را نمایش می‌دهد، ولی یک مثال نوعی نیست، زیرا




(الف) انرژی الکترون به صورت تابعی از فاصلهٔ بین دو پروتون، R.



(ب) انرژی کل مشتمل بر دافعهٔ هسته‌ای، $e^2/\varepsilon\pi\varepsilon_\circ R$.

شکل ۴-۷: [اقتباس از کتاب زیر:
Quantum Theory of Molecules and Solids, Vol. 1, by J.C. Slater © 1963, McGraw - Hill Book Company Inc.]

یون مولکول حاصل H_2^+ دارای بار است. وقتی اتمهای خنثی به وسیلهٔ الکترونهایی که به طور یکسان به اشتراک گذاشته شده‌اند، مقید می‌شوند، لزوماً باید از هر یک از اتمها یک الکترون برای تشکیل پیوند برداشته شده باشد. ساده‌ترین مثال پیوندی از این نوع در مولکول هیدروژن خنثی، H_2، است و بحث مختصری پیرامون توابع موج الکترونی در این مورد آموزنده است. اگر از دافعهٔ کولنی متقابل بین دو الکترون صرفنظر کنیم، آنگاه می‌توانیم آنها را به طور مستقل مطالعه کنیم و نتایجی را، که برای یون H_2^+ به دست آوردیم، بلادرنگ به کار بریم. پایین‌ترین

حالت انرژی با قرار دادن هر دو الکترون در اوربیتال پیوندی به دست می‌آید و این امر از نظر اصل طرد به شرطی مجاز است که الکترونها دارای اسپین مخالف هم باشند. این وضعیت به وسیله تابع موج حاصل ضرب سادهٔ زیر نمایش داده می‌شود:

$$\Psi(\mathbf{r}_a\ ,\ \mathbf{r}_b) = \Psi_+\ (\mathbf{r}_a)\Psi_-\ (\mathbf{r}_b) \qquad (۱۷-۴)$$

که تحت تعویض مختصات دو الکترون، $\mathbf{r}_a$ و $\mathbf{r}_b$، متقارن است؛ اسپینهای مخالف هم حکایت از تابع موج اسپین پاد متقارن دارد که در نتیجه تابع موج کل را چنانکه باید پاد متقارن می‌سازد.

این رهیافت ذرهٔ مستقل رهیافتی است که در بخش بعدی در مورد زنجیری از اتمها به کار گرفته خواهد شد. نه چندان به این دلیل که تقریب مناسبی است (هر چند معلوم می‌شود که تقریب مناسبی نیز هست) بلکه بیشتر به این دلیل که در غیر این صورت مشکلات بسیار بیشتر می‌شود. از این رو آموزنده است که در مورد سادهٔ مولکول هیدروژن به بررسی نوعی از خطاها، که در این رهیافت حادث می‌شود، بپردازیم. برای انجام این کار تابع موج معادلهٔ (۴-۱۷) را، با استفاده از شکل تقریبی ψ_+ در معادله (۴-۱۵) به طور کامل می‌نویسیم

(۱۸-۴)

$$\Psi(\mathbf{r}_a\ ,\mathbf{r}_b) = \phi_۱(a)\phi_۱(b) + \phi_۲(a)\ \phi_۲(b) + \phi_۱(a)\ \phi_۲(b)\ + \phi_۲(a)\phi_۱(b)$$

در اینجا از نمادها به این صورت استفاده کرده‌ایم، که برای مثال، $\phi_۱(a)$ متناظر با الکترون a در حالت ϕ واقع بر اتم ۱ است. وابستگی زمانی $\Psi\ (\mathbf{r}_a\ ,\ \mathbf{r}_b)$ را حذف کرده‌ایم. این وابستگی فقط حاکی از آن است که در غیاب بر هم کنشهای الکترون ـ الکترون، انرژی دو الکترون برابر $۲(B\text{-}A)$ است. اگر توجه کنیم که $\phi_۱$ در مجاورت هستهٔ ۱ و $\phi_۲$ در مجاورت هستهٔ ۲ بزرگتر است، آنگاه می‌بینیم که دو جملهٔ اول در تابع موج (۴-۱۸) تعبیر فیزیکی نسبتاً متفاوتی با دو جمله آخر دارند. وقتی هر دو الکترون نزدیک هستهٔ ۱ باشند، جملهٔ اول دامنه‌ای بزرگ دارد، جملهٔ دوم وقتی دامنهٔ بزرگ دارد که هر دو الکترون نزدیک هستهٔ ۲ باشند؛ برعکس، دو جملهٔ آخر وقتی دامنه‌ای بزرگ دارند که هر الکترون نزدیک یک هسته باشد. بنابراین، برای فاصله‌های بزرگ بین دو اتم، دو جمله آخر دامنهٔ احتمال یافتن دو اتم هیدروژن خنثی را به دست می‌دهند، در حالی که دو جملهٔ اول دامنه‌ها احتمال یافتن یک پروتون تنها H^+ و یک یون هیدروژن منفی H^- رابه دست می‌دهد. در تقریب ذرهٔ مستقل این حالتها انرژی یکسانی دارند، زیرا انرژی همبستگی یک الکترون به یک پروتون، صرفنظر از اینکه الکترون دیگری از قبل به این پروتون مقید شده‌است یا خیر، برابر یک ریدبرگ است. ولی، برهم کنش الکترون ـ الکترون انرژی همبستگی الکترون

دوم را فقط به قدر ۰/۰۵ ریدبرگ کاهش می‌دهد و به این ترتیب تمایز آشکاری بین حالتهای $H+H$ و $H^{+}+H^{-}$ وجود دارد؛ انرژی بالاتر حالت دوم به این معناست که در حد فاصلهٔ زیاد تقریباً یقین داریم که هر الکترون را نزدیک یک پروتون می‌یابیم. بر عکس معادلهٔ (۴-۱۸) برای حالتهای $H+H$ و $H^{+}+H^{-}$ دامنهٔ یکسانی را ارائه می‌کند.

برای فاصله‌های بین هسته‌ای کوچکتر، که در آن ϕ_1 و ϕ_2 همپوشانی قابل ملاحظه‌ای دارند، دیگر نمی‌توان بین دو نوع حالت تمایز آشکاری قائل شد و دیگر بدیهی نیست که تقریب ذرهٔ مستقل نامناسب باشد؛ در هر حال نمی‌توان استنتاج کرد که این تقریبی است مناسب، بلکه باید همواره در مورد آن هوشیار بود. نتیجه مهمی که می‌توانیم از استدلال بالا بگیریم آن است که وقتی اتمها به هم نزدیک می‌شوند تا جامد را بسازند، در حالی که فاصله اتمها از یک دیگر زیاد است، نباید توقع داشته باشیم که توابع موج الکترونی‌ای به دست آوریم که در سرتاسر بلور گسترش داشته باشد. حالتهای گسترده اشاره بر آن دارند که احتمال متناهی‌ای وجود دارد که برخی از اتمها الکترونهای ظرفیتی بیشتر از دیگر اتمها داشته باشند و به دلیل وجود برهم کنشهای الکترون ـ الکترون، چنین حالتهایی نسبت به حالتهایی که در آنها الکترونهای ظرفیتی روی اتمهای خود جایگزیده‌اند، انرژی بالاتری دارند. می‌توانیم گذار به حالتهای گسترده را در یک فاصلهٔ متناهی بحرانی بین اتمی انتظار داشته باشیم، و در نتیجه گذار به رفتار فلزی روی دهد و در واقع به نظر می‌رسد که همین طور هم هست. در بخش ۱۳-۵-۶ به بحث فراتری دربارهٔ این امکان می‌پردازیم.

۴-۳-۳ حالتهای الکترونی زنجیر یک بعدی

حال سعی می‌کنیم جوابهای حالت مانای به شکل معادله (۴-۸) مربوط به احتمال جفتیدهٔ (۴-۹) را بیابیم. از بخش پیشین می‌دانیم رهیافتی را که دنبال می‌کنیم اساساً تعمیمی است از شگرد ترکیب خطی اوربیتالهای اتمی برای یافتن حالتهای الکترونی در مولکولها به زنجیر ماکروسکوپی. با توجه به این امر که معادلات (۴-۹) شباهت زیادی با معادلات (۲-۷) دارند، جوابهای معادلات (۴-۹) را خواهیم یافت؛ تنها اختلاف عمده در آن است که مشتقات زمانی به جای d^2/dt^2، به صورت id/dt هستند، زیرا معادلات (۴-۹) از معادله شرودینگر حاصل شده‌اند نه از معادلهٔ کلاسیکی حرکت. یافتن جوابهای معادلات (۴-۹) به شکل معادلهٔ (۴-۸) متناظر است با یافتن مدهای بهنجار ارتعاش زنجیر؛ با توجه به اینکه این مدها با اعمال شرایط مرزی دوره‌ای به صورت امواج متحرکی هستند [معادله (۲-۸)]، در جستجوی جوابهای موج متحرک به همان شکل برای معادلات (۴-۹) خواهیم بود:

$$c_n = C\,exp\,[i\,(kx_n^{\circ} - \omega t)] \qquad (۴\text{-}۱۹)$$

که در آن $x_n^{\circ} = na$ مکان ترازمند اتم nام موجود در زنجیر است. با قرار دادن این جواب در معادلات (۴-۹) خواهیم داشت

$$\hbar\omega\, e^{i(kna-\omega t)} = Be^{i(kna-\omega t)}\, A\, e^{i[k(n-1)a-\omega t]} - A\, e^{i[k(n+1)a-\omega t]}$$

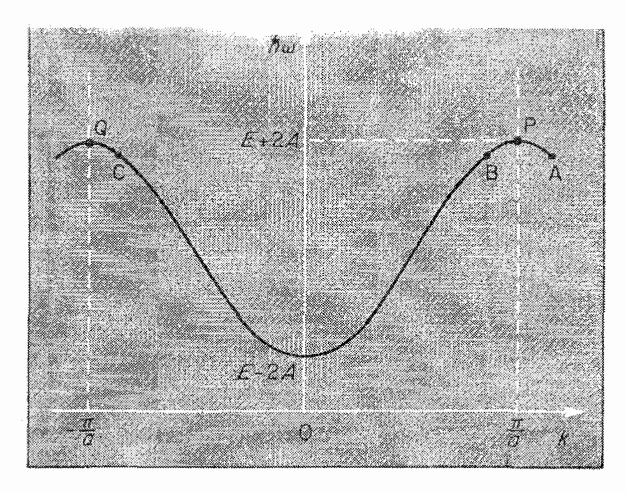
یا پس از حذف عامل $e^{i(kna-\omega t)}$، در می‌یابیم که معادلهٔ (۴-۱۹) جوابی از معادلات (۴-۹) است، به شرط آنکه انرژی εی این حالت به صورت زیر به عدد موج k مرتبط باشد:

$$\varepsilon = \hbar\omega = B - Ae^{-ika} - A\, e^{ika} = B - 2A\cos(ka) \qquad (۴-۲۰)$$

ضرائب $a_n(t)$ در تابع موج الکترونی [معادلهٔ(۴-۷)] نیز به شکل موج گونهٔ معادلهٔ (۴-۱۹) هستند؛ بنابراین حالتهای الکترونی زنجیر یک بعدی موج گونه‌اند و در سرتاسر بلور گسترش دارند[1]. رابطهٔ پاشندگی برای این امواج [معادله (۴-۲۰)] در شکل ۴-۸ رسم شده است. می‌بینیم که تبهگنی حالتهای مربوط به اتمهای منزوی، در اثر جفتیدگی، از بین رفته است و یک نوار انرژی به پهنای $4A$ تولید شده‌است. همانند مورد ارتعاشات شبکه، ω تابعی است دوره‌ای از kبا دورهٔ $2\pi/a$. فرض جفتیدگی تنها با نزدیکترین همسایه‌ها، در مورد معادلهٔ (۴-۹) نیز مانند قبل، برای این دوره‌ای بودن، اساسی نیست؛ جملات حاوی c_{n-2}و c_{n+2}در معادلهٔ (۴-۹) فقط به پیدایش یک جملهٔ بر حسب $\cos(2ka)$ در معادلهٔ (۴-۲۰) منجر می‌شوند. بنابراین جفتیدگی پیچیده‌تر فقط هماهنگهایی به منحنی $\varepsilon(k)$ می‌افزاید؛ دورهٔ بنیادی همان $2\pi/a$ می‌ماند، که این تنها به فاصله شبکه‌ای بستگی دارد.

با استدلالی مشابه آنچه در مورد ارتعاشات شبکه به کار می‌رفت می‌توانیم نشان دهیم که گسترهٔ عدد موج برابر است با $-\pi/a<k<\pi/a$ ، یعنی منطقهٔ اول بریلوئن تمام وضعیتهای فیزیکی ممکن را توصیف می‌کند. اگر محور قائم در شکل ۲-۵ را، به جای جابه جایی اتمی u_n نشانگر c_n بگیریم، آنگاه، شکل ۲-۵ (ب) نشان می‌دهد که چگونه آن مقادیر c_n ، که به وسیلهٔ موجی با $|k|>\pi/a$ (نقطهٔ A در شکل ۴-۸) داده می‌شود، را می‌توان به طور هم ارز به وسیلهٔ موجی با $|k|<\pi/a$ (نقاط B و C در شکل ۴-۸) نمایش داد. نقاط Aو C حالتهایی را نمایش می‌دهند که سرعت گروه $d\omega/dk$ منفی دارند و بنابراین بسته‌های موج الکترونی چپ‌رو را نمایش می‌دهند. بنابراین Aو C کاملاً هم‌ارزاند؛ نقطهٔ B نمایشگر بسته موجی است مشابه‌ولی‌راست رو. اعمال شرایط مرزی دوره‌ای، همچون گذشته (بخشهای ۲-۳-۱ و ۴-۲)، مشخص می‌کند که تعداد مقادیر مجاز k در هر منطقهٔ بریلوئن با Nعده اتمهای موجود در زنجیر برابر است.

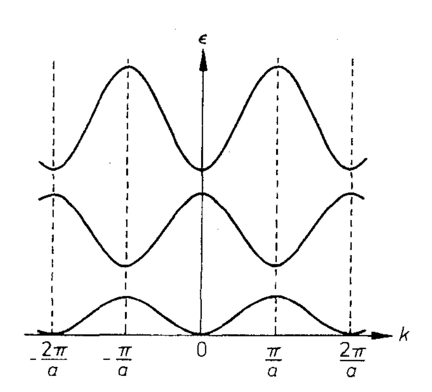
۱- نتیجه‌ای کلی موسوم به **قضیهٔ بلوخ** وجود دارد، که نشان می‌دهد حالتهای الکترونی در یک پتانسیل دوره‌ای همواره موج گونه‌اند. این قضیه دربخش ۳-۱۱ بحث شده‌است.



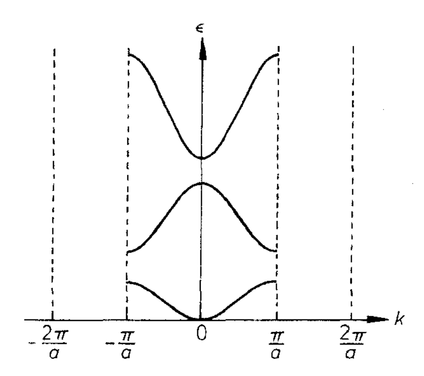
شکل ۴-۸: نتیجهٔ تنگ بست برای انرژی به صورت تابعی از عدد موج مربوط به الکترونهای موجود در زنجیر یک بعدی از اتمها.

شکل ۴-۸ بینش فراتری نسبت به این پرسش، که چرا یک نوار انرژی پر نمی‌تواند جریان الکتریکی حمل کند، در اختیار می‌گذارد. نوار پر متناظر است با آنکه تمامی حالتهای بین Q و P اشغال شده باشند. میدان الکتریکی سبب انتقالی در توزیع فضای k [معادلهٔ (۴-۳۴)] به حالتهای، مثلاً بین C و A می‌شود. بنابراین اثر میدان آن است که باعث می‌شود الکترونهای حالتهای موجود در QC به حالتهای موجود در PA منتقل شوند. ولی در بالا نشان داده‌ایم که حالتهای موجود در PA دقیقاً همانند حالتهای موجود در QCاند، به طوری که میدان الکتریکی توزیع الکترونی را به هیچ وجه تغییر نمی‌دهد و جریان تولید نمی‌کند. یک حالت حامل جریان تنها وقتی می‌تواند ایجاد شود که برخی از الکترونها، مانند شکل ۴-۳(ب)، به نوار انرژی بالاتری بروند.

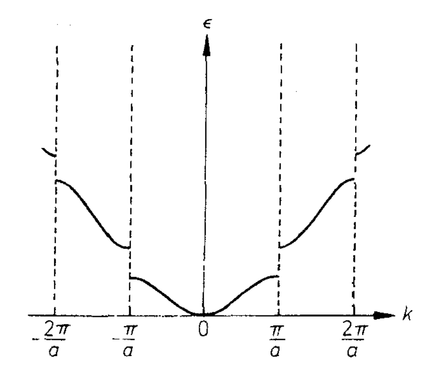
آزادی عمل برای توصیف حالتهای یکسان به وسیله مقادیری از k که به اندازهٔ مضربی درست از $2\pi/a$ با هم اختلاف دارند، امکان می‌دهد که هر منطقهٔ بریلوئنی را، برای ترسیم رابطهٔ $\varepsilon(k)$، برگزینیم. این آزادی عمل امکان برقراری متناظری با رابطهٔ $\varepsilon(k)$ مربوط به نظریهٔ الکترون آزاد را فراهم می‌سازد [شکل ۴-۲]. نخست باید فرض کنیم که حالتهای اتمی با انرژی بالاتر، مطابق شکل ۴-۹(الف)، به نوارهای انرژیهای بالاتری منجرمی‌شوند؛ این روش ترسیم، که در آن رابطه پاشندگی مربوط به هر نوار به طور دوره‌ای در سرتاسر فضای $\mathbf{k}$ ادامه می‌یابد به **طرح منطقهٔ تکراری** موسوم است. توجه کنیدکه فرض کرده‌ایم A در نوارهای پیاپی تغییر علامت می‌دهد و لذا انرژی کمینهٔ نوار به طور یک در میان در $k=0$ و $k=\pi/a$ واقع است. این فرض، یک رابطهٔ پاشندگی، بسیار شبیه رابطهٔ پاشندگی مربوط به نظریهٔ الکترون تقریباً آزاد



(الف) طرح منطقهٔ تکراری



(ب) طرح منطقهٔ تحویل یافته

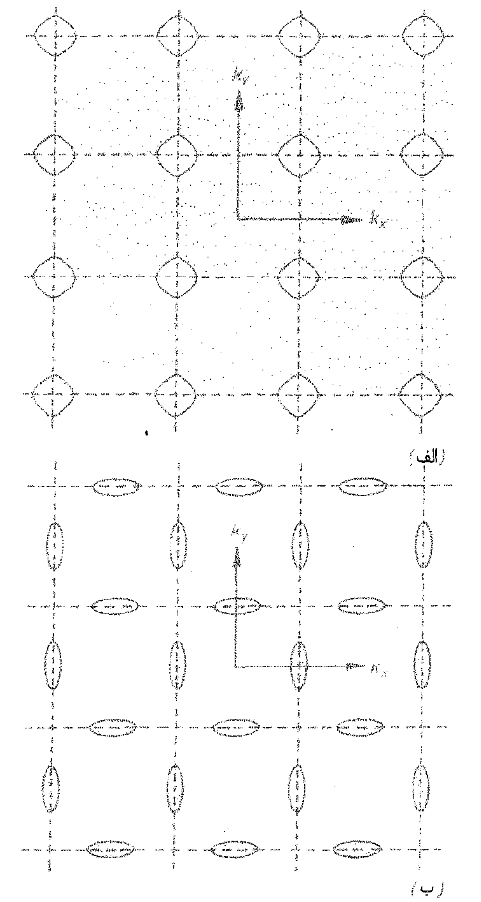


(ج) طرح منطقهٔ گسترده.

شکل ۴-۹ : راههای متفاوت ترسیم منحنی‌های $\varepsilon(k)$ برای الکترونهای در نوارهای انرژی مختلف.

تولید می‌کند؛ استدلال مربوط به علامت A در بخش ۴-۳-۲ به استفاده از توابع موج $1s$، که همه جامثبت است، بستگی دارد. در شکل ۴-۹(ب) رابطهٔ پاشندگی مربوط به شکل ۴-۹(الف) مطابق **طرح منطقهٔ تحویل** یافته رسم شده‌اند. دراین طرح فقط منطقهٔ اول بریلوئن مورد استفاده قرار می‌گیرد، زیرا این منطقه تمامی جوابهای فیزیکی متمایز را شامل می‌شود. شکل ۴-۹(ج) روابط پاشندگی را در **طرح منطقهٔ گسترده** نشان می‌دهد. در این طرح نوارهای انرژی بالاتر پیاپی، در منطقه‌های بالاتر بریلوئن رسم می‌شوند؛ این نمودار است که در آن تشابه کّمی با رهیافت الکترون تقریباً آزاد به بهترین نحو آشکار است. رهیافت تنگ بست ما را قادر می‌سازد که هر نوار انرژی را با تراز اتمی‌ای، که نوار از آن بروز می‌کند، برچسب بزنیم. بنابراین الکترونهای ظرفیتی در سدیم جامد را در نوار انرژی $3s$ می‌یابیم.

کاربری طرح منطقهٔ تکراری، برای ترسیم سطح فرمی فلز دو بعدی مربوط به شکل ۴-۵(ب)، را در شکل ۴-۱۰ نمایش می‌دهیم. برای هریک از نوارهای انرژی همپوشان به یک نمودار و در نتیجه در کل به دو نمودار نیاز است.



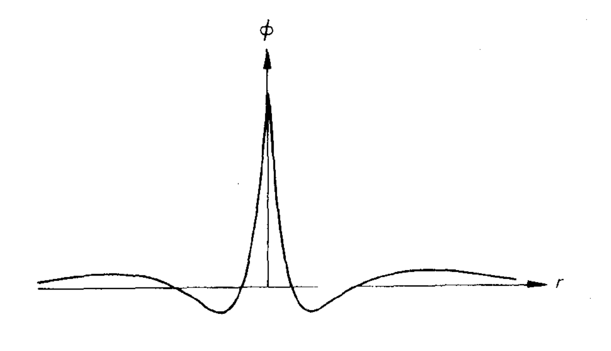
شکل ۴-۱۰ : سطح فرمی فلز دو ظرفیتی دوبعدی شکل ۴-۵(ب)، که دریک طرح منطقهٔ تکراری رسم شده‌است؛ حالتهای اشغال شده سایه زده شده‌اند. (الف) بسته‌های حالتهای *اشغال نشده*، که از تکرار دوره‌ای نقش درون منطقهٔ اول بریلوئن در شکل ۴-۵ (ب) در فضای k حاصل شده است. (ب) بسته‌های حالتهای اشغال شدهٔ حاصل از تکرار دوره‌ای نقش منطقهٔ دوم بریلوئن در شکل ۴-۵ (ب).

تا اینجا از این امکان که حالتهای الکترونی مغزهای یونی ممکن است باهم جفت شوند و به یک نوار انرژی منجر شوند چشم پوشی کرده‌ایم. معمولاً این جفتیدگی آنقدر ضعیف است که تبهگنی ترازهای انرژی به طور محسوس از بین نمی‌رود و حالتهای الکترونی مغز جایگزیده‌اند. ولی، وقتی خارجی‌ترین حالتهای مغز به طور کامل پرنباشد، مثلاً در مورد حالتهای ۳d مربوط به فلزات واسط، وضعیت چنین نیست . به هیچ وجه روشن نیست که آیا بهتر است این الکترونها را در حالتهای اتمی جایگزیده بگیریم، یا آنها را بخشی از نواری از الکترونهای متحرک تلقی کنیم. به هم پکیدگی بیشتر اتمها و انرژی همبستگی بالاتر فلزات واسط را می‌توان به پیوند کووالان مربوط به همپوشانی پوسته‌های ۳dی پرنشدهٔ یونهای همسایه نسبت داد.

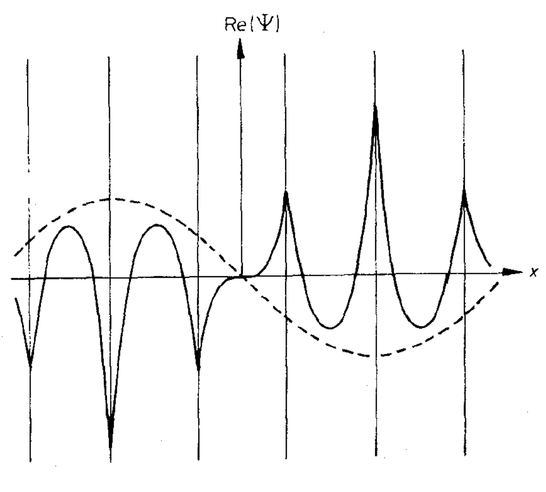
برای نمایش چگونگی شکل توابع موج تنگ بست در فلز یک بعدی سدیم، اوربیتال ۳s **هیدروژن** [۴-۱۱(الف)] را برای ϕ_n در معادلهٔ (۴-۷) به کار می‌بریم [1]. $a_n(t)$ همان شکل $c_n(t)$ را دارد، معادلهٔ (۴-۱۹)، و به این ترتیب **قسمت حقیقی** تابع موج را مطابق شکل ۴-۱۱ (الف) به دست آوردیم؛ مقدار a را برابر، ۳/۶۶ Å (فاصلهٔ نزدیکترین همسایه در فلز واقعی سدیم) و k را برابر $\pi/۳a$ (هم‌ارز $\lambda=۶a$) اختیار کرده‌ایم. منحنی خط چین با قسمت حقیقی تابع موج الکترون آزاد با همین مقدار k، یعنی با $\cos(kx)$ متناسب است. قله‌های تیز روی تابع موج تنگ بست در مجاورت هر اتم ناشی از اوربیتال ۳s روی آن اتم هستند؛ سرشت ۳s تابع موج نزدیک به هر هسته باعث می‌شود که این توابع موج تقریباً بر حالتهای اتمی پایین‌تر ۱s، ۲s، ۲p مغز یونی متعامد باشند. می‌توان انتظار داشت که تابع موج تنگ بست انرژی کمتری از تابع موج الکترون آزاد داشته باشد، زیرا قله‌های تیز احتمال یافتن الکترون در همسایگی هسته‌ها را، که در آنجا انرژی پتانسیل کمترین است، افزایش می‌دهد. ولی این کاهش در انرژی پتانسیل به مقدار زیادی با افزایش در انرژی جنبشی مربوط به تغییرات فضایی سریع تابع موج ۳s در مجاورت هسته جبران می‌شود؛ از این رو، با وجود اختلاف بین توابع موج، این دو نظریه روابط پاشندگی مشابهی را به دست می‌دهند.

جبران انرژیهای جنبشی و پتانسیل را، که هم اکنون بحث شد، می‌توان از قبل در یک اتم منزوی مشاهده کرد. پتانسیل یک یون Na^+، در فواصل دور، همان پتانسیل مربوط به تک بار الکتریکی مثبت است، ولی در فواصل کوتاهتر برابر پتانسیل ناشی از باری بزرگتر است، زیرا بار هسته‌ای تماماً به وسیلهٔ پوستهٔ درونی استتار نمی‌شود. بنابراین می‌توانیم انتظار داشته باشیم که الکترون ۳s در سدیم نه به طور قویتر از الکترون ۱s در هیدروژن مقید باشد. با این همه پتانسیل یونش

۱- اوربیتال ۳s در سدیم از نظر کیفی مشابه است و در فاصله‌های زیاد از هسته دارای همان وابستگی مجانبی به موقعیت خواهد بود.



(الف) تابع موج $3s$ هیدروژن.



(ب) قسمت حقیقی تابع موج تنگ بست معادلهٔ (۴-۷) حاصل از به کارگیری تابع موج $3s$ هیدروژن برای ϕ و با فرض $a = ۳/۶۶\,\text{Å}$ و $\lambda = ۶a$. خطوط قائم مکان اتمها را نمایش می‌دهند و مقیاس افقی همان مقیاس شکل ۴-۱۱(الف) است. منحنی نقطه‌چین قسمت حقیقی تابع موج الکترون آزاد با همان طول موج است.

شکل ۴-۱۱

هیدروژن $۱۳/۶\ eV$ و از آن سدیم $۵/۱\ eV$ است . دلیل این امر آن است که تابع موج $3s$ نسبت به تابع موج $1s$ تغییرات بیشتری دارد و انرژی جنبشی حاصل پتانسیل جاذبه را تا حدود زیادی جبران می‌کند. از این رو پتانسیل یونش اتم آزاد راهنمای بهتری برای پتانسیل دوره‌ای **مؤثر** در جامد است تا پتانسیل کولنی یون آزاد.

۴-۳-۴ حالتهای الکترونی در الماس ، سیلیسیم و ژرمانیوم

پیکربندی الکترونی اتم کربن منزوی $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$ است. در بلور الماس [شکل ۱-۱۵(الف)] در هر یاختهٔ یکه بسیط دو اتم کربن و در نتیجه هشت الکترون ظرفیتی موجوداست. برای ساختن توابع موج تقریبی برای این الکترونها، با استفاده از رهیافت تنگ بست، باید معادلهٔ (۴-۷) [که در آن c_n و بنابراین a_n به شکل معادلهٔ (۴-۱۹) هستند] را به بلور سه بُعدی‌ای که در هر یاختهٔ یکه بسیط بیش از یک اتم دارد تعمیم دهیم. تعمیم مناسب به قرار

زیر است:

$$\Psi = \sum_{n} C\, e^{i\,(\mathbf{k}.\mathbf{r}_n - \omega t)}\, \phi_n \qquad \textbf{(۴-۲۱)}$$

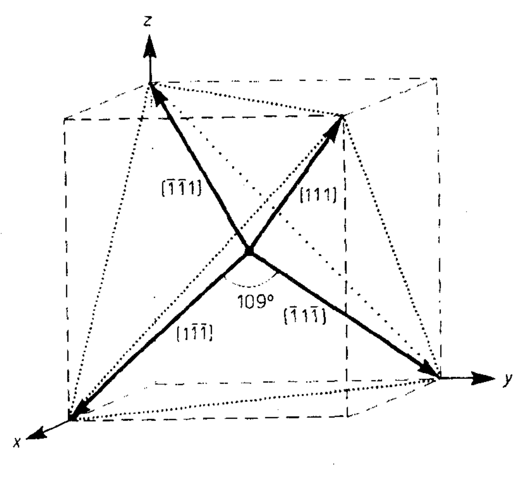
که در آن مجموعیابی روی اتمها **نیست**، بلکه روی نقاط شبکه‌ای واقع در مکانهای $\mathbf{r}_n$ است که با معادلهٔ (۱-۲) بیان می‌شوند. به طور متناظر مقادیر $\mathbf{k}$ ،که به ازای آنها امواج ساکن و در نتیجه گافهای انرژی ظاهر می‌شوند، به وسیلهٔ دورهٔ شبکه تعیین می‌شوند و تابع موج ϕ_n باید اوربیتالی مناسب برای پایهٔ دو اتمی وابسته به هر نقطهٔ شبکه باشد نه اوربیتال مربوط به یک اتم منزوی.

تابع ϕ باید ترتیب چهار وجهی نزدیکترین همسایه‌ها در ساختار الماسی را منعکس کند. حالتهای $2s$ و $2p$ ی اتم منزوی تقارن مناسب را ندارند ولی می‌توان ترکیب‌های خطی‌ای از این حالت ساخت که تقارن مناسب داشته باشند (مسئلهٔ ۴-۵ را ببینید). در توضیح پیوند چهار وجهی کربن در مولکولهای آلی، از قبیل متان، نیز همین شیوه به کار می‌رود؛ در این مورد آمیزهٔ توابع موج s و p، برای تولید توابع موج با تقارن چهاروجهی را **هیبریدشدگی** sp^3 می‌نامند، زیرا در این آمیزه هر سه تابع موج p درگیر می‌شوند. چهارترکیب خطی مختلف از توابع موج می‌توان به دست آورد، که هر یک متناظر با تراکم الکترونی زیاد در یک ناحیه در راستای یکی از چهار جهت چهار وجهی است (شکل ۴-۱۲)[1] .

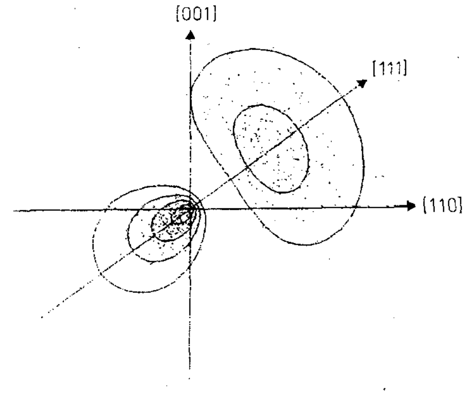
همین که اوربیتالهای اتمی با تقارن چهار وجهی مناسب، به وسیلهٔ فرایند هیبریدشدگی sp^3 به دست آمد، یک اوربیتال مولکولی مناسب برای پایهٔ دو اتمی می‌توان از ترکیب خطی اوربیتالهای اتمی مربوط به اتمهای همسایه به دست آورد. راه روشن انجام این کار استفاده از اوربیتالهای پیوندی و پادپیوندی (بخش ۴-۳-۲ را ببینید) وابسته به همپوشانی ناحیهٔ چهار وجهی یک اتم در سمتگیری مناسب با همسایهٔ آن است؛ تراکم الکترونی افزایش یافته در ناحیهٔ بین نزدیکترین همسایه‌های مربوط به ترکیب پیوندی [شکل ۴-۱۲ (ج)] را می‌توان با پیوند کووالانی بین اتمها شناسایی کرد. چهار ترکیب پیوندی و چهار ترکیب پادپیوندی، هشت اوربیتال مولکولی ممکن برای درج در معادلهٔ (۴-۲۱) فراهم می‌کند و لذا به هشت نوار انرژی منجر می‌شوند، که برای جای دادن $16N$ الکترون کفایت می‌کنند، که در آن N تعداد یاخته‌های یکهٔ بسیط در بلور است . چون $8N$ الکترون ظرفیتی وجود دارد و الماس عایق است، می‌توان استنتاج کرد که چهارتای این نوارها (آنهایی که به پیوندهای کووالانی مربوط می‌شوند) کاملاً پراند و چهارتای دیگر با یک گاف انرژی از نوارهای پر جدا می‌شوند.

وضعیت برای سیلیسیم و ژرمانیوم در صفر مطلق شبیه به وضعیت کربن است، جز آنکه، به

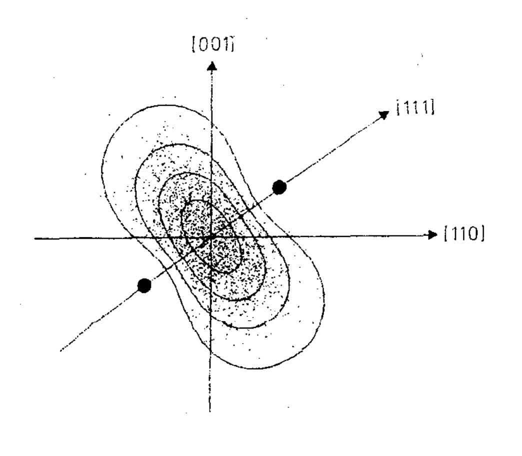
۱- هیبریدشدگی sp^2 و sp^1 نیز روی می‌دهد. اولی اوربیتالهای با تقارن مناسب لایه‌های اتمهای کربن موجود در ساختار گرافیت را تولید می‌کند (مسئلهٔ ۴-۶ را ببینید).



(الف) جهتهای چهار وجهی نزدیکترین همسایه‌ها در ساختار الماسی عبارتند از جهتهای $[111]$، $[1\bar{1}\bar{1}]$، $[\bar{1}1\bar{1}]$ و $[\bar{1}\bar{1}1]$ که متوجه گوشه‌های یک مکعب‌اند.



(ب) مقطعی از یک اوربیتال هیبریدشدهٔ sp^3 در راستای $[111]$. تراکم نقاط و خطوط پربندی نشانگر چگالی احتمال الکترون هستند. هسته در مبداء واقع است. این شکل با استفاده از توابع موج $2s$ و $2p$ی هیدروژن تولید شده‌است.



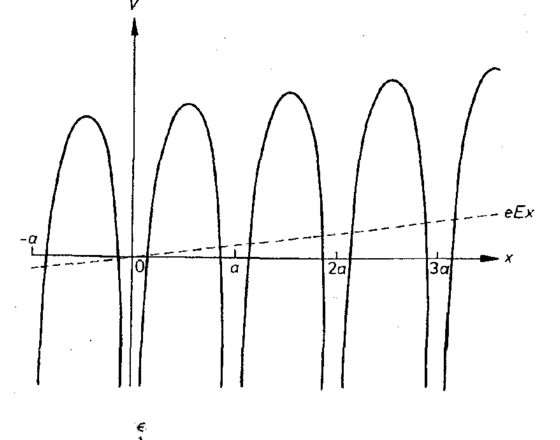
(ج) اوربیتال پیوندی حاصل از همپوشانی اوربیتالهای هیبریدشدهٔ sp^3 [نظیر بند(ب)] در اتمهای همسایه؛ تراکم نقاط و خطوط پربندی نشانگر چگالی احتمال الکترون‌اند. درج اوربیتالی از این نوع در معادله (۴-۲۱) توابع موج تقریبی برای الکترونهای ظرفیتی درگیر در پیوند کووالان موجود در الماس را تولید می‌کند. مکانهای هسته‌ای با دوائر مشخص شده‌اند؛ فاصله بین هسته‌ها طوری برگزیده شده است که همپوشانی را بیشینه کند. توجه کنید که چهار وجهی اوربیتالهای هیبرید شده دراتم در جهت مخالف چهار وجهی اوربیتالهای هیبریدشده درهمسایهٔ آن‌است.

شکل ۴-۱۲

ترتیب اوربیتالهای $3p$، $3s$ و $4p$ و $4s$ هستند که درگیر فرایند هیبرید شدگی می‌شوند. گاف انرژی (فصل بعد را ببینید) بین نوارهای اشغال شده و اشغال نشده هم دائماً، با افزایش عدد اتمی، به تدریج به نحوی کاهش می‌یابد که در سیلیسیم و ژرمانیوم در دماهای متناهی الکترونهای کافی از یک سوی گاف به سوی دیگر آن برانگیخته می‌شوند تا رفتار نیمرسانایی را تولید کنند. ترکیبهای نیمرسانا‌ها از قبیل $InSb$ و $GaAs$ از ترکیب عنصری از گروه ۳ (مثل In یا Ga) و عنصری از گروه ۵ مثل (Sb یا As) ساخته می‌شوند. حالتهای الکترونی همانند حالتهای الکترونی در ژرمانیوم و سیلیسیم هستند با این تفاوت که سه تا از الکترونهای ظرفیتی درگیر در پیوند کووالان از عناصر گروه ۳ و ۵ تای دیگر از عناصرگروه ۵ آمده‌اند.

۴-۴ جرمهای مؤثر ساختار نواری

در این بخش ادعایی را، که در بخش ۳-۳-۱ مطرح شد، اثبات می‌کنیم، براساس این ادعا اثر پتانسیل دوره‌ای شبکه روی دینامیک بسته‌های موج الکترون رسانش را می‌توان، با به کارگیری جرم مؤثر m_e به جای جرم خالص m، در معادلات حرکت به حساب آورد. اثر میدان الکتریکی استاتیکی یکنواخت E را که بر زنجیر یک بعدی اعمال می‌شود، بررسی خواهیم کرد. انرژی پتانسیل الکترواستاتیکی eEx الکترونها در حضور میدان، مطابق شکل ۴-۱۳ (الف)،



(الف) انرژی پتانسیل الکترونی در میدان الکتریکی یکنواخت که بر پتانسیل دوره‌ای شبکهٔ شکل ۴-۱(الف) اضافه شده است. خطچین شیبدار مقدار متوسط "موضعی" انرژی پتانسیل است.

نوار انرژی
گاف انرژی
نوار انرژی
گاف انرژی
نوار انرژی

(ب) نوارهای شیبدار انرژی در حضور میدان الکتریکی یکنواخت.

شکل ۴-۱۳

شیب یکنواختی برپتانسیل دوره‌ای شبکه خواهد افزود و به این ترتیب همان گونه که نشان داده‌شده است ، انرژی پتانسیل متوسط موضعی شیبی برابر eE کسب می‌کند. برای میدانهایی که معمولاً اعمال می‌شود، تغییر در انرژی پتانسیل متوسط در مقیاس طول اتمی کوچک است و در این شرایط رابطهٔ $\varepsilon(k)$ برای الکترونها همان عبارت مربوط در غیاب میدان است، جز آنکه باید ε را نسبت به پتانسیل متوسط موضعی اندازه‌گیری کرد. از این رو همان گونه که در شکل ۴-۱۳ (ب) نشان داده شده است، نوارهای "شیبدار" انرژی با شیب eE به دست خواهیم آورد.

حرکت یک بسته موج الکترونی حاصل از برهم نهی حالتهای مربوط به یکی از نوارهای انرژی را محاسبه خواهیم کرد. فرض می‌کنیم که در لحظهٔ معین t، این بسته موج از حالتهای متمرکز برانرژی ε و عدد موج k ساخته شده باشد. می خواهیم حرکت این بسته موج را دربارهٔ زمانی بعدی δt بررسی کنیم. برای این کار فرضهای زیر را وضع می‌کنیم:

(الف) سرعت بسته موج برابر سرعت گروه است.

$$v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon}{dk} \qquad (۴\text{-}۲۲)$$

(ب) حرکت بسته موج همانند حرکت یک ذره کلاسیکی است که در آن انرژی **کل** ثابت می‌ماند. از شکل ۴-۱۴ پیداست که اگر این بسته موج در بازهٔ δt مسافت δx را بپیماید، در آن صورت تغییر $\delta\varepsilon$ در انرژی جنبشی با عبارت زیر بیان می‌شود:

$$\delta\varepsilon = -eE\,\delta x \qquad (۴\text{-}۲۳)$$

معادلات (۴-۲۲) و (۴-۲۳) را به کار می‌بریم تا معادله حرکت رابه دو شکل مفید به دست آوریم. از معادلهٔ (۴-۲۲)، تغییر δk در k در زمان δt : عبارت است از :

$$\delta k = \frac{dk}{d\varepsilon}\,\delta\varepsilon = \frac{1}{\hbar v}\,\delta\varepsilon$$

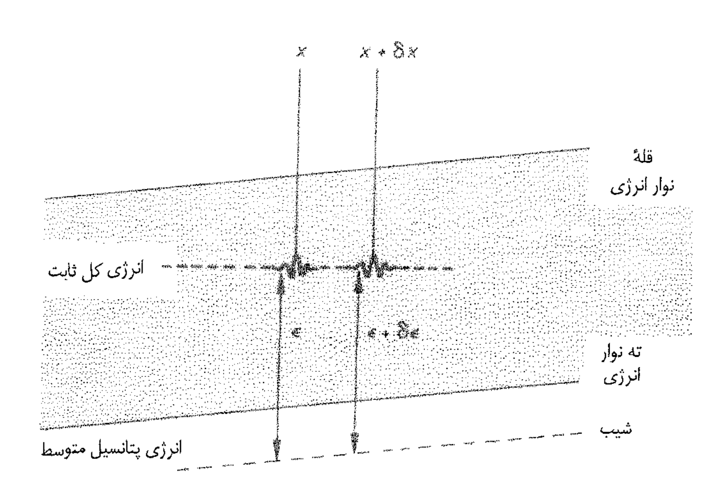
بنابراین با استفاده از معادلهٔ (۴-۲۳) و $v = dx/dt$ می‌توان نوشت

$$\frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar v}\frac{d\varepsilon}{dt} = -\frac{eE}{\hbar v}\frac{dx}{dt} = -\frac{eE}{\hbar}$$

یا

$$k\frac{dk}{dt} = -eE \qquad (۴\text{-}۲۴)$$

این شکل از معادلهٔ حرکت دقیقاً بیانگر این حکم است که آهنگ تغییر اندازه حرکت با نیروی اعمال شده برابر است. تغییر در اندازه حرکت را نمی‌توان تنها به الکترون نسبت‌داد، زیرا،



شکل ۴-۱۴: حرکت یک بسته موج الکترونی با انرژی ثابت در حضور میدان الکتریکی. مکان بسته موج در زمانهای t و $t+\delta t$ به ترتیب، عبارت است از x و $x+\delta x$.

همان‌گونه که در بخش ۱۳-۳-۱ نشان خواهیم داد، بخشی از اندازه حرکت به تمامی شبکهٔ بلور مربوط می‌شود. به همین دلیل $\hbar k$ را ***اندازه حرکت بلوری*** الکترون می‌خوانند.

با به کارگیری مفهوم جرم مؤثر می‌توان معادلهٔ حرکت را به شکل آشنای دیگری نوشت و آنرا بدون نگرانی درباره اختلاف مهم بین اندازه حرکت واقعی و اندازه حرکت بلوری الکترون به کار برد. برای این کار از معادلهٔ (۴-۲۲) مشتق زمانی می‌گیریم و معادلهٔ (۴-۲۴) را به کار می‌بریم بنابراین

$$\frac{dv}{dt}=\frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}\left(\frac{d\varepsilon}{dk}\right)=\frac{1}{\hbar}\frac{d^{2}\varepsilon}{dk^{2}}\frac{dk}{dt}=-\frac{1}{\hbar^{2}}\frac{d^{2}\varepsilon}{dk^{2}}eE \qquad (۴-۲۵)$$

این معادلهٔ را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$m_e\frac{dv}{dt}=-eE \qquad (۴-۲۶)$$

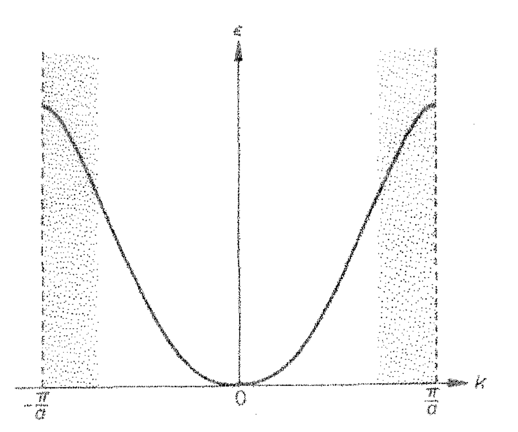
این همان قانون دوم نیوتن برای ذره‌ای با بار $-e$ و جرم m_e است. از مقایسهٔ معادلات (۴-۲۵) و (۴-۲۶) جرم مؤثر به قرار زیر به دست می‌آید:

$$m_e=\hbar^{2}/(d^{2}\varepsilon/dk^{2}) \qquad (۴-۲۷)$$

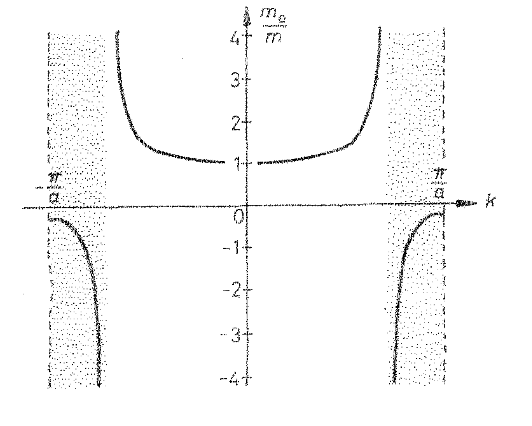
درستی استفاده از جرم مؤثر در دینامیک الکترون را فقط در میدان الکتریکی dc اعمال شده به

بلور یک بعدی و در غیاب برخوردها اثبات کرده‌ایم، ولی امیدواریم خواننده، همان گونه که قبلاً فرض کرده‌ایم، بپذیرد که تعمیم مناسب معادلهٔ (۴-۲۶) در واقع معادلهٔ (۳-۲۳) است. معادلهٔ سه بعدی هم ارز معادلهٔ (۴-۲۷) برای جرم مؤثر در بخش ۱۳-۳-۱ آمده است.

خواننده، باید برای خود امتحان کند که از معادلهٔ (۴-۲۷)، برای رابطهٔ پاشندگی الکترون آزاد به صورت $\varepsilon=\hbar^{2}k^{2}/2m$ ، $m_e=m$ به دست آید. برای رابطهٔ پاشندگی درون نوار انرژی نوعی، نظیر آنچه در شکل ۴-۵ (الف) نشان داده شده است (به شکلهای ۴-۲ و ۴-۸ مراجعه شود)، عبارت $d^{2}\varepsilon/dk^{2}$ ، برای مقادیر کوچک k ، مثبت، برای تمام مقادیر k که به ازای آنها انحنا (خمیدگی) پاشندگی صفر شود، صفر و به ازای تمام مقادیر k بزرگتراز این مقدار، منفی است. بنابراین جرم مؤثر، به گونه‌ای که در شکل ۴-۱۵(ب) نمایش داده شده است، با k تغییر می‌کند و برای



(الف) رابطهٔ پاشندگی الکترون برای یک نوار انرژی نوعی $d^{2}\varepsilon/dk^{2}$ در نواحی سایه زده شده از فضای k منفی است.



(ب) نسبت جرم مؤثر m_e در معادلهٔ (۴-۲۷) به جرم خالص الکترون برای رابطهٔ پاشندگی‌بند (الف). m_e/m در ناحیهٔ سایه زده شده از فضای k منفی است.

شکل ۴-۱۵

حالتهای نزدیک به قلهٔ نوار انرژی، منفی است. توجه کنید که جرم مؤثر در مجاورت قله و ته نوار انرژی، با k، بسیار آهسته تغییر می‌کند؛ این امر به این دلیل است که منحنی $\varepsilon(k)$ در مجاورت یک بیشینه یا یک کمینه تقریباً سهموی است و از این رو شکل آن همانند رابطهٔ پاشندگی ذرهٔ آزاد است (مسئلهٔ ۴-۷ را ببینید). فیزیکدانان مفهوم ذرهٔ با جرم مؤثر منفی را تقریباً غیر قابل هضم (درک) می یابند و برای توصیف حرکت الکترونهای واقع در حالتهای نزدیک به قلهٔ نوار انرژی رهیافت دیگری به‌کار می‌برند. این رهیافت که در فصل بعد بررسی می‌شود، از این امر بهره می‌جوید که رفتار الکترونها در حالتهای نزدیک قلهٔ انرژی هم ارز حالتهای ***اشغال نشده*** است که رفتار شبیه رفتار ذرات با بار مثبت و جرم مثبت دارند. این ذرات تصوری، حفره نام دارند و نقش مهمی در توضیح نیمرسانا ایفا می‌کنند.

باید سریعاً به خواننده‌ای، که نگران مفهوم ضمنی جرم مؤثر منفی برای ظرفیت گرمایی است (بخش ۳-۲-۳ راببینید) اطمینان دهیم که جرم مؤثر متفاوتی، m^*، برای این خاصیت مناسب است. از بحث ارائه شده در بخش ۳-۲-۳ روشن است که ظرفیت گرمایی با استفاده از چگالی حالتها به ازای واحد گسترهٔ انرژی $g(\varepsilon)$ در انرژی فرمی تعیین می‌شود و این مقدار همواره مثبت است. برای محاسبهٔ m^* برای یک فلز یک بعدی ابتدا $g(\varepsilon)$ را محاسبه می‌کنیم. با ادامهٔ کار مانند بخش ۳-۲ و استفاده از چگالی $\rho_R(k)$ حالتهای موج متحرک در معادلهٔ (۲-۳۰)، برای یک بلور یک بعدی به طول L، داریم

$$g(\varepsilon) = 4\rho_R(k)\left|\frac{dk}{d\varepsilon}\right| = \frac{2L}{\pi}\left|\frac{dk}{d\varepsilon}\right| \qquad \text{(۴-۲۸)}$$

ضریب ۴ برای منظور کردن تبهگنی اسپین و نیز تقارن موجود بین دوناحیهٔ فضای k حول $k=0$، که در آن گسترهٔ $d\varepsilon$ انرژی ظاهر می‌شود، وارد شده است (در یکی از ناحیه‌ها $d\varepsilon/dk>0$ و در دیگری $d\varepsilon/dk<0$، ولی هر دو ناحیه سهم مثبت یکسانی در چگالی حالتها دارند؛ بنابراین بزرگی $d\varepsilon/dk$ مهم است). از معادلات (۴-۲۸) و (۳-۵) برای الکترون آزاد چنین به دست می‌آوریم

$$g(\varepsilon_F) = \frac{2mL}{\pi\hbar^2 k_F} \qquad \text{(۴-۲۹)}$$

در حالی که در حالت کلی، می‌توان نوشت

$$g(\varepsilon_F) = \frac{2L}{\pi}\left|\frac{dk}{d\varepsilon}\right|_F = \frac{2L}{\pi\hbar v_F} \qquad \text{(۴-۳۰)}$$

زیر نویس F مقدار هر کمیت را در سطح فرمی نمایش می‌دهد. مقایسهٔ معادلات (۴-۲۹) و (۴-۳۰) نشان می‌دهد که در تعیین گرمای ویژه، الکترونها رفتاری شبیه ذراتی دارند که جرم مؤثر

آنها عبارت است از :

$$m^* = \hbar^2 k_F \left| \frac{dk}{d\varepsilon} \right|_F = \frac{\hbar k_F}{v_F} \qquad (۴\text{-}۳۱)$$

محاسبهٔ بر اساس این معادله، برای رابطهٔ پاشندگی شکل ۴-۱۵ (الف)، اگر "سطح" فرمی واقع در $k=\pi/a$ باشد، m^* نامتناهی می‌دهد. ولی، این وضعیت به یک نوار پر و رفتار عایق مربوط می‌شود، که در آن با وجود نامتناهی بودن چگالی حالتها، ظرفیت گرمایی الکترونی، در دماهای پایین‌تر صفر می‌شود، زیرا هیچ حالت تهی با انرژی پایین، که در آن الکترونها بتوانند، به طور گرمایی برانگیخته شوند، موجود نیست.

مسایل ۴

۴-۱ ثابت کنید که $\phi_1 = sin\ (kx)$ و $\phi_2 = cos\ (kx)$ تنها ترکیب‌های خطی متعامد e^{ikx} و e^{-ikx} هستند که، ***برای تمام مقادیر*** k، در معادلهٔ زیر صدق می‌کنند:

$$\int \phi_1^* \, V\phi_2 \, dx = 0$$

که در آن V پتانسیل دوره‌ای شبکه، معادلهٔ (۴-۲)، است.

۴-۲ نشان دهید که موج تخت $e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}$ شرط براگ [معادلهٔ (۱-۳)] برای پراش حاصل از شبکه مربعی ساده از اتمهای یکسان، با فاصله شبکه‌ای a، را به این شرط برآورده می‌کند که

$$k_x = \pm\pi/a \quad \text{یا} \quad k_y = \pm\pi/a$$

این شرط مرزهای منطقهٔ اول بریلوئن را درفضای $\mathbf{k}$ مشخص می‌کند.

۴-۳ نظریهٔ الکترون تقریباً آزاد، در مجاورت مرز $k=\pi/a$ منطقهٔ اول بریلوئن مربوط به زنجیر یک بعدی از اتمهای یکسان با فاصلهٔ شبکه‌ای a، پیشگویی می‌کند که تنها جملهٔ مهم در پتانسیل شبکهٔ معادلهٔ (۴-۲) عبارت $V_1 cos\,(2\pi x/a)$ و تابع موج تقریباً به صورت زیر است:

$$\psi = \alpha\, e^{ikx} + \beta\, e^{i\,(k - 2\pi/a)x}$$

این تابع موج را در معادلهٔ شرودینگر قرار دهید.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d\psi}{dx^2} + V\psi = \varepsilon\psi$$

(الف) معادلهٔ حاصل را در e^{-ikx} ضرب کنید و روی تمام فضا انتگرال بگیرید و (ب) در

$e^{-i(k-2\pi/a)x}$ ضرب کنید و روی تمام فضا انتگرال بگیرید. با این در بایست که دو معادلهٔ حاصل جوابی غیر صفر برای α و β داشته باشند، نشان دهید که انرژی ε مربوط به تابع موج بالا را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma} \left\{ \left(\frac{\pi}{a} - k\right) \pm \left[\left(\frac{\pi}{a} - k\right)^2 + \left(\frac{amV_1}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

این مطلب حدس ما دربارهٔ شکل منحنی $\varepsilon(k)$، دور از مرز منطقهٔ بریلوئن در شکل ۴-۲ را، تأیید می‌کند. می‌توانید بیازمایید که این معادله در $k=\pi/a$ جوابی درست به دست می‌دهد و برای مقادیر k کاملاً دور از مرز منطقه به نتیجهٔ الکترون آزاد تبدیل می‌شود.

۴-۴ یک فلز یک ظرفیتی فرضی متشکل از یک شبکهٔ مکعبی ساده از اتمها با فاصلهٔ شبکه‌ای a است. نظریهٔ الکترون آزاد را به کار برید و شعاع کرهٔ فرمی را محاسبه کنید. نزدیکترین فاصله بین این کره و مرز منطقهٔ بریلوئن را محاسبه کنید. آیا این کره به طور کامل درون منطقهٔ اول بریلوئن جای می‌گیرد؟ انتظار دارید که این سطح فرمی چگونه به وسیلهٔ پتانسیل دوره‌ای شبکه اصلاح شود؟

۴-۵ مجموعه‌ای از توابع موج بهنجار و متقابلاً متعامد حالت p برای یک اتم را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$p_x = xf(r) \quad , \quad p_y = yf(r) \quad , p_z = zf(r)$$

ترکیب خطی زیر را درنظر بگیرید:

$$\psi = a_x p_x + a_y p_y + a_z p_z$$

چهار مجموعه از ضرائب (a_x, a_y, a_z) را چنان بیابید که توابع موج بهنجار حالت p با قسمتهای مثبت متوجه گوشه‌های یک چهار وجهی منظم را به دست می‌دهد. (به یادآورید که چهارتا از گوشه‌های یک مکعب منطبق بر گوشه‌های یک چهار وجهی منظم محاط شده در مکعب‌اند.) ترکیب خطی زیرا در نظر بگیرید:

$$\phi = bs + c\psi$$

که در آن ψ یکی از چهار تابع موج محاسبه شده در بالا و s تابع موج حالت s است که بهنجار و بر p_x، P_y و P_z متعامد است. مقادیر b و c را چنان بیابید که چهار تابع موج ϕها حاصل بهنجار و بر هم متعامد باشند. این چهار تا تابع موج را برحسب p_x، P_y، P_z و s بیان کنید. (اینها توابع موج هیبریدی sp^3 هستند).

۴-۶ توابع موج هیبریدی sp^2 درگیر در پیوند لایه‌های دو بعدی اتم کربن در گرافیت به شکل

زیراند:

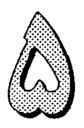
$$\chi = \alpha s + \beta p_x + \gamma p_y$$

که در آن توابع موج s، p_x و P_y توابع موج s و p ی تعریف شده در مسئلهٔ قبل هستند. مقادیر α، β و γ را طوری بیابید که سه تابع موج بهنجار و متقابلاً متعامد با قسمتهای مثبت تحت زاویهٔ $^\circ$۱۲۰ درجه نسبت به هم در صفحهٔ xy باشند.

۷-۴ چگونگی تغییر جرم مؤثر m_e الکترون با عدد موج را برای رابطهٔ پاشندگی تنگ بست معادلهٔ (۴-۲۰) محاسبه کنید. نشان دهید که مقدار به دست آمده به ازای $k = \pi / a$ با مقدار حاصل از بسط ε تا مرتبهٔ دوم برحسب $(k - \pi / a)$ حول $k = \pi / a$، توافق دارد.

بشر غیرمنطقی، همچنان می‌کوشد جهان را با خویش تطبیق دهد. بنابراین پیشرفت به بشر غیرمنطقی بستگی دارد.

جورج برناردشاو



نیمرساناها

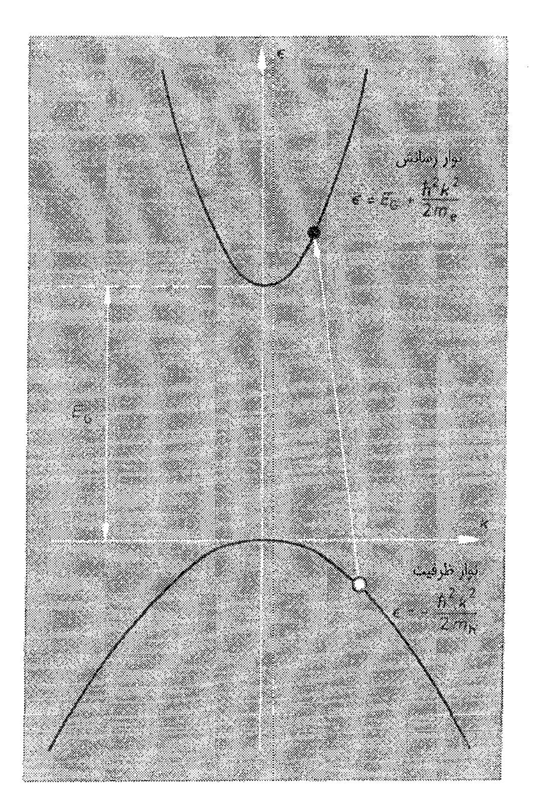
۵-۱ مقدمه

سیلیسیم و ژرمانیوم که از مواد نیمرسانای مهم‌اند بلورهایی با پیوند کووالانی و با ساختار الماسی را می‌سازند (شکل ۱-۱۵) با ترکیبات نیمرسانا، از قبیل GaAs و InSb ساختاری، مانستهٔ سولفیدروی به وجود می‌آورند. در صفر مطلق بالاترین نوار اشغال شدهٔ انرژی کاملاً پر است؛ این نوار موسوم به **نوار ظرفیت** است، زیرا الکترونهای مسئول پیوند کووالانی را در بردارد (بخش ۴-۳-۴ را ببینید). پایین‌ترین نوار اشغال نشدهٔ انرژی را نوار رسانش می‌نامند، این نوار نوعاً توسط گافی از مرتبهٔ ۱eV از نوار ظرفیت جدا می‌شود. رفتار این نیمرسانا عمدتاً الکترونهای حالتهای نزدیک به بالای نوار ظرفیت و حالتهای پایین نوار رسانش است و روابط پاشندگی انرژی برای این حالتها، $\varepsilon(k)$، در شکل ۵-۱ نشان داده شده‌اند.

از آنجا که حالتهای نزدیک به یک بیشینه یا یک کمینهٔ انرژی مورد نظر ماست، می‌توانیم منحنی پاشندگی $\varepsilon(k)$ را با تقریب خوبی به شکل سهمی زیر اختیار کنیم:

$$\varepsilon = E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \qquad \textbf{نوار رسانش} \qquad (5\text{-}1)$$

$$\varepsilon = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} \qquad \textbf{نوار ظرفیت} \qquad (5\text{-}2)$$



شکل ۵-۱: روابط پاشندگی برای الکترونهای واقع در نزدیک بالای نوار ظرفیت و در ته نوار رسانش (شکل ۴-۹ (ب) را ببینید). همان طور که نشان داده شده است گذار یک الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش، حفره‌ای در نوار ظرفیت به وجود می‌آورد.

که در آن E_G گاف انرژی است و صفر انرژی پتانسیل را در بالای نوار ظرفیت اختیار کرده‌ایم. بنابراین الکترونها در نزدیکی ته نوار رسانش مانند ذرات آزاد با جرم مثبت m_e رفتار می‌کنند. ولی الکترونهای واقع در حالتهای نزدیک بالای نوار ظرفیت به صورتی پدیدار می‌شوند که دارای یک جرم مؤثر $-m_h$ ، هستند، هرچند الکترونهای در حالتهای پایین‌تر در نوار ظرفیت دارای جرم مؤثر مثبت هستند، (شکل ۴-۱۵ (ب) را ببینید). محاسبهٔ ویژگیهای یک نوار ظرفیت تقریباً پر درنگاه اول بسیار مشکل به نظر می‌رسد، ولی روش ساده و ظریفی وجود دارد که از این مشکلات اجتناب می‌کند. با چشم‌پوشی کامل از حالتهای پر و در نظر گرفتن هر حالت خالی به گونه‌ای که گویی توسط ذره‌ای با بار مثبت $|e|$ ، جرم مثبت m_h [1] و انرژی $\frac{+\hbar^2 k^2}{2m_h}$

۱- از آنجا که در نزدیکی بالای نوار فقط حالتهای خالی وجود دارد، جرم مؤثر مناسب برای تمام این حالتها m_h است.

اشغال شده است (همان گونه که در شکل ۵-۲ نشان داده شده است)، رفتار یک نوار ظرفیت تقریباً پر را می‌توان محاسبه کرد. این ذرات فرضی را **حفره** می‌نامند.

۵-۲ حفره

ویژگیهای نوار ظرفیت را با حذف تنها یک الکترون مثلاً از حالت **k** مورد بررسی قرار خواهیم داد. با این سؤال که چقدر انرژی و چه اندازه حرکت باید به بلور اضافه شود تا با انتقال الکترون ازحالت **k** در نوار ظرفیت به حالت $\mathbf{k}_1$ در نوار رسانش، مطابق شکل ۵-۱، حفره‌ای ایجاد شود انرژی و اندازه حرکت این حفره رامشخص می‌کنیم. انرژی مورد نیاز، با استفاده از معادلات (۵-۱) و (۵-۲) برابر است با

$$\Delta\varepsilon = E_G + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_e} - \left(-\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}\right)$$

$$= \left(E_G + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_e}\right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}$$

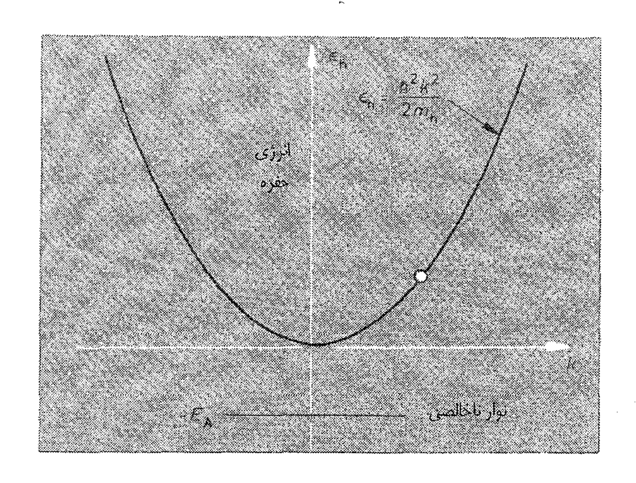
جملهٔ نخست، در پرانتز، به وضوح انرژی الکترون در نوار رسانش است. بنابراین جملهٔ دوم به منزلهٔ انرژی لازم برای ایجاد حفره مشخص می‌شود و مثبت است. درنتیجه انرژی حفره در حالت **k** به قرار زیر است

$$\varepsilon_h = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} \tag{۵-۳}$$

که در شکل ۵-۲ رسم شده است. بنابراین رابطهٔ پاشندگی حفره توسط وارون سازی این رابطه برای الکترون نوار ظرفیت به دست می‌آید. با استدلالی مشابه، دورکردن یک الکترون بااندازه حرکت (به عبارت دقیق اندازه حرکت بلوری) $\hbar\mathbf{k}$ از نوار ظرفیت متناظر با افزودن اندازه حرکت ($-\hbar\mathbf{k}$) به نوار ظرفیت است، به طوری که اندازه حرکت (بلوری) حفره در حالت **k** به قرار زیر است.

$$\mathbf{P}_h = -\hbar\mathbf{k} \tag{۵-۴}$$

برای به دست آوردن معادلهٔ حرکت یک حفره، اثر میدان الکتریکی dc در غیاب برخوردها را مورد بررسی قرار می‌دهیم. از معادلهٔ (۴-۲۴) می‌دانیم که اثر میدان این است که باعث می‌شود، بردار **k** ی تمام الکترونهابا آهنگ یکنواخت یکسان در فضای - **k** حرکت کند. شکلهای ۵-۳



شکل ۵-۲: رابطهٔ پاشندگی برای حفره‌ها در نوار ظرفیت به صورت منفی این رابطه برای الکترونهاست. تراز ناخالصی عبارت از انرژی یک حفرهٔ مقید به یک ناخالص پذیرنده است.

(الف) و (ب) توزیع الکترونی را در دو زمان متوالی نشان می‌دهند. می‌بینیم که حفره در این توزیع توسط الکترونهای موجود در حالتهای اشغال شده "جاروب" می‌شود. بنابراین نتیجهٔ مهم آن است که معادلهٔ حرکت این حفره دقیقاً همانند معادلهٔ حرکت یک الکترون در همین حالت است؛ با استفاده از نتایج فصل ۴، این معادله را می‌توان به هریک از دو شکل (۴-۲۴) و (۴-۲۶) نوشت، یعنی

$$\hbar d\mathbf{k}/dt = -e\mathbf{E}$$

یا

$$-m_h \, d\mathbf{v}_h \;/dt = -e\,\mathbf{E}$$

که درآن برای اثبات اینکه جرم مؤثر الکترونها در نزدیکی بالای نوار ظرفیت در حقیقت برابر $-m_h$ است، از معادلات (۴-۲۷) و (۵-۲) استفاده شده است. در اینجا $\mathbf{v}_h$ سرعت یک بسته موج است. این بسته موج با سنتز فوریه از حالتهای مختلف نوار ظرفیت تشکیل شده است، در هریک از این حالتها الکترونی از یک حالت با $\mathbf{k}$ ی متفاوت حذف شده است) از آنجاکه حرکت حفره توسط حرکت الکترونهای واقع در حالتهای همسایه تعیین می‌شود. $\mathbf{v}_h$ درست همان سرعت گروه الکترون است که توسط معادلهٔ (۴-۲۲) داده می‌شود، یعنی

$$\mathbf{v}_h = \frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon}{d\mathbf{k}} \qquad (5\text{-}5)$$

دو شکل معادلهٔ حرکت که در بالا بیان شد را می‌توان به صورت زیر باز نوشت

$$\frac{d\mathbf{p}_h}{dt} = e\mathbf{E} \tag{۶-۵}$$

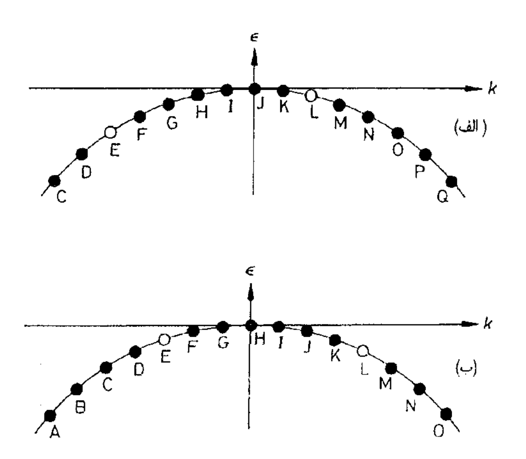
$$m_h \frac{d\mathbf{v}_h}{dt} = e\mathbf{E} \tag{۷-۵}$$

که در آن معادلهٔ (۵-۴) را به‌کار برده‌ایم. معادله‌های حرکت به این شکل همانند معادلهٔ حرکت یک ذرهٔ باردار مثبت $+e$ و جرم مثبت m_h است. توجه کنید که سرعت‌حفره را به صورت زیر نیز می‌توان نوشت

$$\mathbf{v}_h = \frac{\mathbf{d}\varepsilon_h}{d\mathbf{p}_h} \tag{۸-۵}$$

که برای سرعت ذره‌ای با انرژی ε_h و اندازه حرکت $\mathbf{p_h}$ مناسب است. امیدواریم که خواننده بپذیرد که تعمیم مناسب معادلهٔ (۵-۷) برای به حساب آوردن وجود برخوردها و میدان مغناطیسی به قرار زیر است

$$m_h \left(\frac{d\mathbf{v}_h}{dt} + \frac{\mathbf{v}_h}{\tau_h} \right) = e\left(\mathbf{E} + \mathbf{v}_h \times \mathbf{B}\right) \tag{۹-۵}$$



شکل ۵-۳: قسمتهای (الف) و (ب)، توزیع الکترونی در فضای k برای نوار ظرفیت را در دو زمان متوالی نشان داده و نمایش می‌دهد که چگونه میدان الکتریکی dc، درغیاب برخوردها، باعث حرکت الکترونها در فضای k آهنگ مانای $dk/dt = -eE/\hbar$ می‌شود. حالتهای اشغال نشده (EوL) در راستای حرکت الکترونها جاروب می‌شوند، در نتیجه حرکت یک حفره‌همانند حرکت یک الکترون در همان حالت است.

(معادلهٔ ((۳-۲۳) را ببینید). پراکندگی یک حفره از حالت $\mathbf{k}_1$ به حالت $\mathbf{k}_2$ متناظر است با پراکندگی یک الکترون از حالت $\mathbf{k}_2$ به حالت $\mathbf{k}_1$، به طوری که زمان پراکندگی برای حفره‌ها، τ_h، مستقیماً به زمان پراکندگی الکترونها مربوط می‌شود.

برای تکمیل این اثبات که رفتار نوار ظرفیت تقریباً پر را می‌توان صرفاً با بررسی حالتهای خالی بیان کرد، باید نشان دهیم که جریان حمل شده توسط کل این نوار را می‌توان به صورت یک جریان حفره‌ای توصیف کرد. اقدام قاطع آن است که از این حقیقت استفاده کنیم که نوار پر هیچ جریانی را حمل نمی‌کند. بنابراین برداشتن یک الکترون از حالت $\mathbf{k}$ جریان کل j را به وجود می‌آورد که برابر منهای جریان حمل شده توسط الکترون است. بنابراین $\mathbf{j} = -(-e)\,\mathbf{v}$ که در آن $\mathbf{v}$، سرعت گروه الکترون، با سرعت گروه حفره‌ای در همین حالت برابر است. در نتیجه جریان برابر $+e\,\mathbf{v}_h$ است و بنابراین برابر جریانی است که به طور طبیعی به یک حفره در حالت $\mathbf{k}$ مربوط می‌شود. از آنجا که جریان کل را می‌توان به صورت جمع سهمهای جریان ناشی از الکترونها در نوار رسانش و حفره‌ها در نوار ظرفیت نوشت، این الکترونها و حفره‌ها را **حاملهای بار در نیمرسانا** می‌نامند.

۵-۳ روشهای تهیه الکترونها و حفره‌ها

۵-۳-۱ ناخالصی‌های بخشنده و پذیرنده

اگر اتمهایی از گروه پنجم جدول دوره‌ای مانند (فسفر یا ارسنیک) به سیلیسیم یا ژرمانیوم مذاب افزوده شوند این اتمها به هنگام سرد شدن در مکانی که معمولاً توسط یک اتم سیلیسیم یا ژرمانیوم اشغال می‌شود متبلور می‌شوند. این که ناخالص در یک موقعیت **جانشینی** قرار گیرد و نه در یک موقعیت **بین جایگاهی** [1] اهمیت دارد، زیرا این به معنای آن است که پس از تشکیل چهار پیوند کووالانی لازم در این ساختار یک الکترون ظرفیتی اضافی باقی می‌ماند که می‌تواند یکی از حالتهای موجود در نوار رسانش را اشغال کند.

فرار الکترون به فاصله‌ای دور از اتم ناخالصی، این اتم را با بار خالص مثبت بر جای می‌گذارد؛ این بار مثبت در فاصله‌های متناهی نیروی جاذبه‌ای بر الکترون وارد می‌کند و به ایجاد یک حالت مقید برای این الکترون منجر می‌شود. دستگاه "ناخالصی بار دار به اضافهٔ الکترون" مانستهٔ دستگاه "پروتون به اضافهٔ الکترون" است و بنابراین، می‌توانیم قدرت پیوند الکترون ـ ناخالصی را با اتخاذ نتیجهٔ استاندارد برای ترازهای انرژی اتم هیدروژن و به حساب آوردن این واقعیت که در این مورد الکترون در بلور حرکت می‌کند نه در خلاء تخمین بزنیم. لذا برای جرم الکترون m_e را به کار می‌بریم و فرض می‌کنیم که بلور دارای ثابت دی‌الکتریک (پذیرفتاری نسبی) ε است و به دست می‌آوریم

۱- یعنی یک اتم اضافی که در فضای بین اتمهای واقع در جایگاههای بلور شناسی قرار می‌گیرد.

$$E_n = - \frac{m_e e^{۴}}{۲\varepsilon^{۲} \hbar^{۲} n^{۲} (۴\pi\varepsilon_{\circ})^{۲}} \qquad (۱۰\text{-}۵)$$

برای تخمین گسترش فضایی توابع موج حالت مقید، شعاعهای مدارهای متناظر در نظریهٔ بور را به کار می‌بریم،

$$r_n = - \frac{\varepsilon n^{۲} \hbar^{۲}}{m_e e^{۲}} ۴\pi\varepsilon_{\circ} \qquad (۱۱\text{-}۵)$$

جرم مؤثر الکترونها در ژرمانیوم برابر m ۰/۲؛ و ثابت دی الکتریک آن ۱۵/۸ است. با استفاده از این مقادیر در معادلات (۵-۱۰) و (۵-۱۱) برای انرژی پیوند حالت پایهٔ الکترون اضافی و شعاع مدار متناظر تخمین‌های زیر حاصل می‌شوند:

$$E_{۱} = - \left(\frac{m_e}{m\varepsilon^{۲}} \right) \times ۱۳/۶ \; eV \approx - \; ۰/۰۱ \, eV \qquad (۱۲\text{-}۵)$$

و

$$r_{۱} = \left(\frac{\varepsilon m}{m_e} \right) \times ۰/۵۳\text{Å} \approx ۴۰\text{Å} \qquad (۱۳\text{-}۵)$$

eV ۱۳/۶- و Å ۰/۵۳ مقادیر مربوط به هیدروژن هستند. بنابراین ترکیب جرم مؤثر کوچک و ثابت دی‌الکتریک بزرگ، پیوندی بسیار ضعیف برای الکترون اضافی با اتم ناخالصی می‌دهد و تابع موج بسیار گسترده‌ای برای حالت مقید به بار می‌آورد. از آنجا که تابع موج حالت مقید تا تعداد زیادی از قطرهای اتمی گسترش می‌یابد، تخمین ما در به کارگیری جرم مؤثر و ثابت دی‌الکتریک ماکروسکوپی باید به خوبی کارا باشد. توجه کنید که تخمین ما برای انرژی پیوند در دمای اتاق کمتر از kT (eV ۰/۰۲۶) است، در نتیجه انتظار داریم اکثر اتمهای ناخالصی دراین دما یونیده شوند، و الکترونهای اضافی برای حرکت در بلور آزاد باشند؛ درجهٔ یونش در بخش بعد به طور کامل‌تر مورد بحث قرار خواهد گرفت. مقادیر اندازه‌گیری شدهٔ انرژی‌های یونش بخشنده برای سیلیسیم و ژرمانیوم در جدول ۵-۱ ارائه شده‌اند.

معادلهٔ (۵-۱۰) یک سری نامتناهی از حالتهای مقید ارائه می‌کند، ولی این فقط در مورد ایده‌آل یک تک ناخالصی در بلور نامتناهی به کار می‌رود. در عمل می‌توان انتظار داشت که معادلهٔ (۵-۱۰) فقط در موردی به کار می‌رود که فاصلهٔ بین ناخالصی‌ها در مقایسه با اندازهٔ تابع موج حالت مقید بزرگ باشد. چون، مطابق معادلهٔ (۵-۱۱) اندازهٔ تابع موج متناسب با مربع عدد کوانتومی n است، بالاترین تراکمی که انتظار داریم معادلهٔ (۵-۱۰)برای آن به کار رود متناسب با $۱/n^{۶}$ است. بنابراین تراکم حدّی از مرتبهٔ $۱۰^{۲۴} m^{-۳}$ برای $n = ۱$ ، $۱۰^{۲۲} m^{-۳}$ برای $n = ۲$

جدول ۵-۱ گافهای نواری، انرژیهای بخشنده و پذیرنده، گذردهی نسبی و تراکمهای حامل ذاتی برای Si و Ge

	$E_G\ (eV)$	$E_D\ (eV)$		$E_A\ (eV)$			تراکم حامل ذاتی
	در $T=\circ K$	P	As	B	Al	ε	در $\text{۳۰۰}K$ $(m^{-\text{۳}})$
Si	۱/۰۸	۰/۰۴۵	۰/۰۴۹	۰/۰۴۵	۰/۰۵۷	۱۱/۷	$\text{۲}\times\text{۱۰}^{\text{۱۶}}$
Ge	۰/۶۶	۰/۰۱۲	۰/۰۱۳	۰/۰۱۰	۰/۰۱۰	۱۵/۸	$\text{۲}\times\text{۱۰}^{\text{۱۹}}$

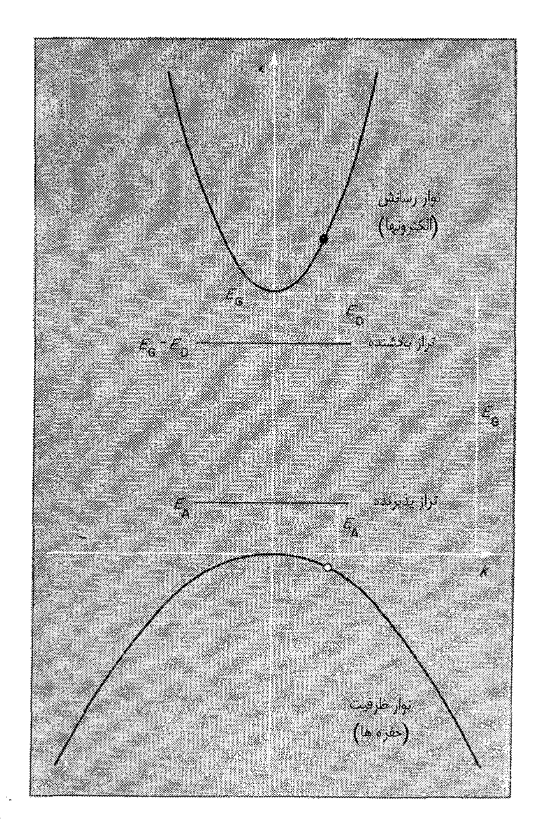
داده‌ها از کتاب زیر است :

American Institute of Physics Handbook, 3rd edn, McGraw-Hill, New York (1972)

و $\text{۱۰}^{\text{۲۱}}\ m^{-\text{۳}}$ برای n=۳ است. لذا در عمل مفهوم حالتهای مقید هیدروژنی فقط در مورد تعدادی از پایین‌ترین ترازها کاربرد دارد. پارامتر مهم در تعیین تعداد ناخالصی‌های یونیده عبارت از اختلاف انرژی بین پایین‌ترین حالت مقید و پایین‌ترین حالت متحرک در ته نوار رسانش است. حضور تعداد بیشتری از حالتهای مقیدی که به ته نوار رسانش بسیار نزدیکترند تأثیر بسیار کوچکی دارد و معمولاً در نظر گرفته نمی‌شود.

بنابراین نمودار تراز انرژی الکترون در شکل ۵-۱، در نزدیکی ته نوار رسانش به صورتی که در شکل ۵-۴ نشان داده شده است تعدیل می‌شود. حالت مقید به منزلهٔ یک **تراز ناخالص بخشنده** شناخته می‌شود زیرا می‌تواند یک الکترون به نوار رسانش بدهد. تراز بخشنده در شکل ۵-۴ با یک خط افقی نشان داده شده است و این نشانگر آن است که به دلیل جایگزیدگی این تراز در فضا، در سنتز فوریهٔ تابع موج حالت مقید، به حالتهای **k** در گستره‌ای متناهی از **k** نیاز است. در صفر مطلق الکترون اضافی وابسته به ناخالصی بخشنده، تراز ناخالص بخشنده را اشغال می‌کند، ولی برای یونیده کردن و بردن آن به نوار رسانش به انرژی نسبتاً کوچکی نیاز است.

آنچه که در مورد ناخالصی‌های گروه پنجم و الکترونها گفته‌ایم عیناً در مورد ناخالصی‌های گروه سوم و حفره‌ها صادق است. یک عنصر گروه سوم، مانند بورون یا آلومینیوم، دارای یک الکترون کمتر از تعدادی است که برای تشکیل چهار پیوند کووالانی در ساختار الماسی سیلیسیم یا ژرمانیوم مورد نیاز است. این عدم وجود الکترون نمایشگر حفره‌ای در نوار ظرفیت است که گرایش به پیوند با یون B^- یا Al^- دارد. این موضوع منجر به پیدایش یک **تراز ناخالصی پذیرنده** برای حفره در حدود $\text{۰/۰۱}eV$ پایین‌تر از ته نوار ظرفیت حفره، مطابق شکل ۵-۲ می‌شود (پذیرنده به این دلیل انتخاب شده است که این ناخالصی الکترونهای نوار ظرفیت را می‌پذیرد). شکل ۵-۴ تراز انرژی الکترونی معادل را نمایش می‌دهد: از آنجا که حفره بهنگامی که به یک ناخالصی پذیرنده مقید می‌شود انرژی پایین‌تری دارد، اشغال تراز پذیرنده توسط یک الکترون



شکل ۵-۴ : حالتهای انرژی الکترونی در شکل ۵-۱ به گونه‌ای تعدیل شده‌اند تا حالتهای مقید در مجاورت ناخالصی‌های بخشنده و پذیرنده را میسر سازند.

نمایشگر حالت انرژی بالاتری برای الکترون نسبت به حالت انرژی در نوار ظرفیت است. مقادیر اندازه‌گیری شدهٔ انرژیهای یونش پذیرنده برای سیلیسیم و ژرمانیوم را در جدول ۵-۱ می‌توان یافت.

توجه داریم که افزودن یک ناخالصی تعداد کل ترازهای انرژی الکترونی را تغییر نمی‌دهد. بلکه ترازها، برای تشکیل ترازهای ناخالصی بخشنده و پذیرنده از نوارهای رسانش و ظرفیت جدا می‌شوند. بنابراین، با وجودی که بلور حاوی یک اتم پذیرنده برای تشکیل تمام پیوندهای کووالان یک الکترون کم دارد، ولی نوار ظرفیت نیز برای تشکیل تراز پذیرندهٔ جایگزیده یک تراز انرژی از دست داده است. لذا درست به تعداد کافی الکترون وجود دارد تا نوار ظرفیت در $T = ۰$ پر شود. به طور مشابه، در $T = ۰$ نوار رسانش نیز کاملاً خالی است.

۵-۳-۲ برانگیختگی‌های گرمایی حاملها

برای محاسبهٔ تعداد حاملهای بار در هر دمای T از نمودار تراز انرژی الکترون در شکل ۵-۴

استفاده می‌کنیم. این نمودار نمایشگر یک ساده سازی در وضعیت واقعی سیلیسیم و ژرمانیوم است زیرا در این مواد کمینهٔ نوار رسانش در $k=0$ نیست؛ این موضوع در هدفهای فعلی ما هیچ تفاوتی به بار نمی‌آورد (در هر حال بخشهای ۵-۴ و ۵-۵-۳ را ببینید). احتمال اشغال حالت انرژی ε توسط تابع توزیع فرمی بیان می‌شود (معادلهٔ (۳-۱۴))

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T}}$$

که در آن مقدار پتانسیل شیمیایی μ را در هر دما باید طوری تنظیم کرد که تعداد کل صحیح ذرات به دست آید. تراز انرژی $\varepsilon = \mu(T)$ موسوم به **تراز فرمی** است و در کتابهای درسی نیمرسانا اغلب، با نماد ε_F نشان داده می‌شود. این موضوع می‌تواند خیلی گیج کننده باشد زیرا در فصل ۳ قرارداد متداول مکانیک آماری را دنبال کردیم و این نماد را برای مقدار μ در $T = 0$ نظر گرفتیم. برای سازگاری بین فصلهای کتاب این روش را ادامه می‌دهیم ولی خواننده باید در تشخیص بین کاربرد ما از واژهٔ "انرژی فرمی" در مورد $\mu(0)$ و "تراز فرمی" در مورد $\mu(T)$ مراقب باشد

عامل دیگری که اشغال حالتهای موجود در نوارهای رسانش و ظرفیت را تعیین می‌کند چگالی حالتها در گسترهٔ واحد انرژی است. این چگالی را می‌توان به همان طریقی که در بخش ۳-۲ برای الکترونهای آزاد عمل شد محاسبه کرد، به جز اینکه باید به جای رابطهٔ پاشندگی الکترون آزاد، معادلهٔ (۳-۵)، به ترتیب روابط پاشندگی نوارهای رسانش و ظرفیت، معادلات (۵-۱) و (۵-۲)، را به کاربرد. چگالی حالتهای حاصل (معادلهٔ (۳-۷) راببینید) عبارت است از

(۵-۱۴الف) **نوار رسانش**

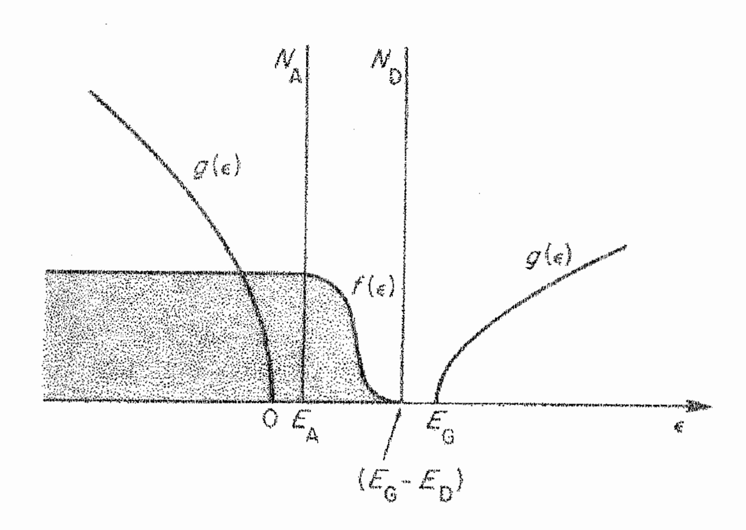
$$g(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2\hbar^3}\,(2m_e)^{3/2}\,(\varepsilon - E_G)^{1/2}$$

(۵-۱۴ب) **نوار ظرفیت**

$$g(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2\hbar^3}\,(2m_h)^{3/2}\,(-\varepsilon)^{1/2}$$

چگالی حالتهای بیان شده توسط معادلهٔ (۵-۱۴) در شکل ۵-۵ رسم شده است. علاوه بر چگالی حالتهای سهموی در نوارهای رسانش و ظرفیت، $N_D\,V$ حالت نیز در انرژی $E - E_D$ و $N_A\,V$ حالت در انرژی E_A وجود دارد که به ترتیب به N_D بخشنده و N_A پذیرنده در واحد حجم[1] مربوط می‌شوند. تابع فرمی نیز در شکل ۵-۵ نشان داده شده است.

۱- از آنجا که فرض می‌کنیم که تمامی ترازهای بخشنده تبهگن هستند، در حقیقت چگالی حالتها در ترازدهنده در واقع نامتناهی است. تابعی که در یک نقطه، نامتناهی و در هر نقطهٔ دیگر صفر است ولی



شکل ۵-۵: چگالی حالتها $g(\varepsilon)$ و تابع فرمی $f(\varepsilon)$ برای یک نیمرسانا با طرح تراز انرژی شکل ۵-۴. تراز فرمی μ معمولاً درون گاف نواری است و به اندازهٔ کافی از لبه‌های نوار دور است به طوری که احتمال اشغال حالتهای نوار ظرفیت و نوار رسانش توسط الکترونها به ترتیب نزدیک ۱ و ۰ است.

$k_B T$ در دمای اتاق به مراتب کوچکتر از E_G است به طوری که همان‌گونه که نشان داده شده است اگر تراز فرمی جایی درون گاف نواری قرار گیرد که خیلی نزدیک به لبهٔ نواری نباشد (وضعیت تقریباً همیشه به همین منوال است)، تابع فرمی درنوار ظرفیت بسیار نزدیک به واحد و در نوار رسانش بسیار کوچک است. در نتیجه می‌توانیم تابع فرمی را به طریقی تقریب بزنیم که برای تعداد الکترونها در نوار رسانش و تعداد حفره‌ها در نوار ظرفیت عبارتهای تحلیلی به دست آوریم. در نتیجه برای انرژی الکترونی ε در نوار رسانش داریم $\varepsilon - \mu \gg k_B T$، و لذا

$$e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} \gg 1$$

و

$$f(\varepsilon) \approx e^{(\mu - \varepsilon)/k_B T} \qquad (۵-۱۵)$$

بنابراین تعداد الکترونها به ازای واحد حجم در نوار رسانش به قرار زیراست

دارای یک سطح زیر منحنی متناهی است، تابع δ نامیده می‌شود (مساحت زیر منحنی چگالی حالتها برابر تعداد حالتهاست). یک تابع δ ی با مساحت واحد در $x=0$ با $\delta(x)$ مشخص می‌شود. بنابراین چگالی حالتهای ترازهای بخشنده را باید به صورت $N_D V \delta(\varepsilon-(E_G - E_D))$ نوشت. که مبین آن است که تابع δ ای است در $\varepsilon = E_G - E_D$ و مساحت زیر آن برابر $N_D V$ است.

$$n=\frac{1}{V}\int_{E_G}^{\infty} f(\varepsilon)g(\varepsilon)d\varepsilon$$

$$\approx\frac{1}{2\pi^2\hbar^3}\int_{E_G}^{\infty}(2m_e)^{3/2}(\varepsilon-E_G)^{1/2}e^{(\mu-\varepsilon)/k_B T}d\varepsilon$$

$$=\frac{(2m_e)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3}e^{(\mu-E_G)/k_B T}\int_{0}^{\infty}(\varepsilon-E_G)^{1/2}e^{-(\varepsilon-E_G)/k_B T}d(\varepsilon-E_G)$$

$$=N_c\, e^{(\mu-E_G)/k_B T} \tag{۱۶-۵}$$

که در آن

$$N_c=2\left(\frac{2\pi m_e k_B T}{h^2}\right)^{3/2} \tag{۱۷-۵}$$

با مقایسهٔ معادلات (۵-۱۵) و (۵-۱۶) می‌بینیم که N_c برابر تعداد مؤثر ترازها به ازای واحد حجم در نوار رسانش است، به شرط آنکه تصّور کنیم این ترازها در ته نوار رسانش، $\varepsilon=E_G$ متراکم شده باشند. وابستگی دمایی N_c به این دلیل بروز می‌کند که ترازها آنچنان متراکم نیستند.

احتمال اینکه حالتی در نوار ظرفیت توسط یک حفره اشغال شود برابر $1-f(\varepsilon)$ است که می‌توان آن را چنین نوشت

$$1-f(\varepsilon)=1-\frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T}+1}=\frac{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T}}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T}+1}$$

$$=\frac{1}{e^{(\mu-\varepsilon)/k_B T}+1} \tag{۱۸-۵}$$

برای $\mu-\varepsilon\gg k_B T$ این عبارت را می‌توان با همان روشی که در مورد استخراج معادلهٔ ۵-۱۵ به کار رفت تقریب زد تا چنین حاصل شود.

$$1-f(\varepsilon)\approx e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} \tag{۱۹-۵}$$

بنابراین تعداد حفره‌ها به ازای واحد حجم در نوار ظرفیت برابر است با

$$p=\frac{1}{V}\int_{-\infty}^{0}[1-f(\varepsilon)]g(\varepsilon)d\varepsilon$$

$$\approx \frac{(2m_h)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \int_{-\infty}^{0} (-\varepsilon)^{1/2}\, e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T}\, d\varepsilon$$

$$= \frac{(2m_h)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3}\, e^{-\mu/k_B T} \int_0^{\infty} \varepsilon_h^{1/2}\, e^{-\varepsilon_h/k_B T}\, d\varepsilon_h$$

$$= N_V\, e^{-\mu/k_B T} \tag{۵-۲۰}$$

که در آن

$$N_V = 2\left(\frac{2\pi m_h k_B T}{h^2}\right)^{3/2} \tag{۵-۲۱}$$

تعداد مؤثر حالتها به ازای واحد حجم در نوار ظرفیت است به شرط آن که تمامی این حالتها در بالای نوار، $\varepsilon = 0$، متراکم شده باشند.

توجه کنید که معادلهٔ (۵-۱۵) پیش بینی می‌کند که احتمال اشغال یک حالت در نوار رسانش توسط الکترون با توزیع کلاسیکی بولتزمن، $f(\varepsilon) \sim exp(-\varepsilon/k_B T)$، بیان می‌شود. بنابراین، انتظار داریم که نتایج مکانیک آماری کلاسیکی برای الکترونهای نوار رسانش معتبر باشند به شرط آن که تقریب منجر به معادلهٔ (۵-۱۵) قابل توجیه باشد. برای مثال، انرژی الکترون در معادلهٔ (۵-۱) به مربع k بستگی دارد، به طوری که همپاری انرژی، برای الکترونهای نوار رسانش درست مانند ذرات در یک گاز کلاسیکی پیش‌بینی می‌کند که میانگین انرژی جنبشی گرمایی به صورت $3\kappa_B T/2$ باشد. درج $\varepsilon_h = -\varepsilon$ در معادلهٔ (۵-۱۹) نشان می‌دهد که حفره‌ها نیز از یک نوع توزیع کلاسیکی بولتزمن پیروی می‌کنند.

آلایش یک نیمرسانای خالص با ناخالصی‌های بخشنده یا پذیرنده همان طوری که به زودی بحث خواهیم کرد، باعث تغییر پتانسیل شیمیایی و در نتیجه تغییر تراکمهای حاملها می‌شود. ولی نخست به نتیجهٔ مهم زیر که از ضرب معادلات (۵-۱۶) و (۵-۲۰) در یکدیگر به دست می‌آید توجه می‌کنیم:

$$np = N_C N_V\, e^{-E_G/k_B T} \tag{۵-۲۲}$$

بنابراین حاصل ضرب تراکم الکترون و حفره با وجودی که به دما بستگی دارد مستقل از تراکم ناخالصی است. معادلهٔ (۵-۲۲) را می‌توان به منزلهٔ مثالی از **قانون اثر جرم**، که در نظریهٔ واکنش‌های شیمیایی به کار می‌رود در نظر گرفت؛ این معادله مانستهٔ حاصل ضرب ثابت غلظت‌های هیدروژن و یون هیدروکسیل در محلولهای آبی متفاوت در دمای یکسان است. ″واکنش شیمیایی″ درنیمرسانا عبارت است از ترازمندی الکترونها و حفره‌ها با انرژی گرمایی به

شکل ارتعاشات شبکه‌ای و تابش جسم سیاه.

۵-۳-۳ رفتار ذاتی

در یک نیمرسانای خالص تراکم الکترون و حفره برابرند زیرا یک حفره در نوار ظرفیت تنها توسط برانگیختگی یک الکترون به نوار رسانش، تولید می‌شود، شکل (۵-۱). بنابراین با استفاده از معادلۀ (۵-۲۲) داریم

$$n_i = p_i = (N_C N_V)^{1/2} e^{-E_G/2k_B T} \quad (۵\text{-}۲۳)$$

زیرنویس i نشانگر آن است که این کمیت‌ها **تراکمهای حامل ذاتی**اند، چنین نامیده می‌شوند زیرا ویژگی ذاتی نیمرسانای خالص هستند. رسانندگی الکتریکی چنین نیمرساناهایی را **رسانندگی ذاتی** می‌نامند. تراکم حامل ذاتی در سیلیسیم و ژرمانیوم در دمای اتاق به ترتیب برابر $2\times10^{16} m^{-3}$ و $2\times10^{19} m^{-3}$ است. با مساوی قرار دادن مقادیر n و p از معادلات (۵-۱۶) و (۵-۲۰) می‌توانیم پتانسیل شیمیایی یک نیمرسانای ذاتی را استنتاج کنیم. بنابراین

$$e^{(2\mu - E_G)/k_B T} = N_V / N_C$$

و

$$\mu = \frac{1}{2} E_G + \frac{1}{2} k_B T / ln(N_V / N_C) = \frac{1}{2} E_G + \frac{3}{4} k_B T\, ln(m_h / m_e) \quad (۵\text{-}۲۴)$$

چون $E_G \gg k_B T$ لذا جملهٔ دوم کوچک است و تراز فرمی اساساً در وسط گاف نواری است. توجه کنید که حاصل‌ضرب تراکمهای الکترون و حفره در هر نیمرسانایی بااستفاده از معادلات (۵-۲۲) و (۵-۲۳) به آسانی چنین نوشته می‌شود:

$$np = n_i^2 (T) \quad (۵\text{-}۲۵)$$

که در آن $n_i(T)$ تراکم حامل ذاتی در همان دماست.

برای یافتن شرایطی که درآن به طور تجربی بتوان انتظار مشاهدهٔ رفتار ذاتی را داشت، بررسی می‌کنیم که با افزودن مقدار بسیار کمی از ناخالصی بخشنده چه اتفاقی می‌افتد. در دمای اتاق، مقادیر کمی از ناخالصی، پتانسیل شیمیایی را فقط به مقدار جزیی تغییر می‌دهد، در نتیجه پتانسیل شیمیایی در نزدیکی مرکز گاف انرژی باقی می‌ماند. تراز بخشنده مطابق شکل ۵-۵ در دم انرژی ـ بالای تابع فرمی قرار می‌گیرد و در نتیجه تقریباً تمامی الکترونهای اتمهای بخشنده در نوار رسانش خواهند بود. بنابراین تراکم الکترونی به شدت تغییر خواهد کرد مگر اینکه تراکم بخشنده در مقایسه با تراکم حامل ذاتی، که توسط معادلهٔ ۵-۲۳ بیان می‌شود، کوچک باشد.

بنابراین لازمهٔ رفتار ذاتی در سیلیسیم در دمای اتاق آن است که $N_D < ۲\times ۱۰^{۱۶} m^{-۳}$. از آنجا که تراکم اتمی برابر $۵\times ۱۰^{۲۸} m^{-۳}$ است، میزان ناخالصی باید کمتر از ۱ در $۱۰^{۱۲}$ باشد.

با وجودی که در مورد ژرمانیوم، لازمهٔ سهلتری وجود دارد (کمتر از ۱ در $۱۰^{۹}$) مشکل فنی ساخت بلورهای با چنین خلوص خارق‌العادهٔ بالا یکی از دلایلی است که چرا پیش از این نیمرساناها به طور گسترده مورد استفاده قرار نگرفته‌اند. کشف **پالایش منطقه‌ای** که به پیشرفتهای نوین انجامید باعث تحّول غیر منتظره‌ای شد. پالایش منطقه‌ای به این حقیقت متکی است که ناخالصی‌ها در مایع بیش از جامد قابل حّل هستند، به طوری که اگر یک منطقهٔ مذاب در طول یک جامد حرکت کند ناخالصی‌ها همراه با آن جاروب می‌شوند. در عمل بلور درست در زیر نقطهٔ ذوب آن در یک کوره قرار می‌گیرد و منطقهٔ کوچکی از آن توسط یک گرم کن القایی کمکی ذوب می‌شود؛ با کشیدن نمونه از میان گرم کن القایی، منطقهٔ مذاب در طول نمونه حرکت می‌کند. این فرایند آنقدر تکرار می‌شود تا خلوص مورد نظر حاصل شود. مادهٔ خالص شده متعاقباً با مقادیر کنترل شدهٔ بخشنده یا پذیرنده **آلوده** می‌شود تا ویژگیهای موردنظر را به بار آورد.

۵-۳-۴ رفتار غیر ذاتی

وقتی پذیرنده‌ها و بخشنده‌ها موجود باشند، پتانسیل شیمیایی با این دربایست که تعداد کل الکترونها باید صحیح باشد تعیین می‌شود. یک راه مناسب برای تحقق این موضوع این است که μ را چنان انتخاب کنیم که بلور از نظر الکتریکی خنثی باشد؛ بلور از اتمهایی که از نظر الکتریکی خنثی هستند تشکیل شده است، در نتیجه باری که در هر نقطه پدیدار شود باید با یک بار مساوی و با علامت مخالف همراه باشد. بارهایی که مورد نظرند عبارتند از الکترونها در نوار رسانش، حفره‌ها در نوار ظرفیت و ناخالصی‌های یونیدهٔ بخشنده و پذیرنده. شرط خنثایی الکتریکی آن است که چگالی‌های بار مثبت و منفی وابسته به این بارها باید مساوی یکدیگر باشند. یعنی

$$n + N_A^- = p + N_D^+ \qquad (۵\text{-}۲۶)$$

که در آن N_A^- و N_D^+ تراکمهای بخشنده‌ها و پذیرنده‌های یونیده‌اند که بر حسب تابع فرمی توسط معادلات زیر بیان می‌شوند[1]

۱- این عبارتها برای N_D^+ و N_A^- کاملاً صحیح نیستند. در این عبارتها این واقعیت که حالتهای مقید ناخالصی می‌توانند با حاملهایی با اسپین بالا (↑) یا با حاملهای اسپین پایین (↓) اشغال شوند، ولی احتمال اشغال مضاعف (به دلیل بر هم کنش‌های الکترون ـ الکترون) صفر است منظور نشده است. با به کارگیری عبارتهای صحیح تفاوت چندانی بروز نمی‌کند

(C.Kittle and H. Kroemer, Thermal Physics,2nd edn, W.H. Freeman, San Fransisco(1980, P.143)

$$N_D^+ = N_D\ [1 - f(E_G - E_D)] \qquad (۲۷-۵)$$

$$N_A^- = N_A\, f(E_A) \qquad (۲۸-۵)$$

با درج معادلات (۵-۱۶) و (۵-۲۰) برای n و p در معادلهٔ (۵-۲۶)، می‌توانیم μ و بنابراین n و p را تعیین کنیم. جوابهای تحلیلی را فقط در موارد خاص حدّی می‌توان به دست آورد و اکنون به بحث در بارهٔ برخی از این موارد می‌پردازیم.

متداولترین وضعیت آن است که در آن ناخالصی‌های از هر دو نوع حاضر باشند. فرض کنیم که تعداد بخشنده‌ها بر تعداد پذیرنده‌ها فزونی یابد. ترازهای پذیرنده انرژی پایین‌تری دارند، به همین دلیل این ترازها در صفر مطلق کاملاً توسط الکترونهای ناخالصی‌های بخشنده اشغال می‌شوند و تعداد $N_D - N_A$ تراز بخشندهٔ غیر یونیده باقی می‌ماند. چون در دمای $T=0$ فقط تراز فرمی است که می‌تواند نیمه‌پر باشد نتیجه می‌شود که $\mu = E_G - E_D$. در دماهای بسیار پایین، $k_B T \ll E_D$، که در آن تعداد بخشنده‌های یونیده چندان تغییر نیافته است، تراز فرمی به این مقدار نزدیک باقی می‌ماند، درنتیجه، با استفاده از معادلهٔ (۵-۱۶)، تراکم الکترونها در نوار رسانش عبارت است از

$$n \approx N_c\, e^{-E_D/k_B T} \quad \text{برای} \quad k_B T \ll E_D \qquad (۲۹-۵)$$

از آنجا که $E_D \ll E_G$، تراکم الکترونی به مراتب بزرگتراست از تراکم ذاتی، که توسط معادلهٔ (۵-۲۳) بیان می‌شود؛ در نتیجه، به دلیل قانون اثر جرم، معادلهٔ (۵-۲۲)، تراکم حفره به مراتب کمتر از مقدار ذاتی آن است. این نوع ماده، که در آن ناخالصیهای بخشنده بیشترانـد و تعداد الکترونها در آن بر تعداد حفره‌ها فزونی می‌یابد، به **مادهٔ نوع n-** معروف است؛ الکترونها **حامل اکثریت** و حفره‌ها را **حاملهای اقلیت** می‌نامند. پذیرنده‌های اضافی با روشی کاملاً مشابه به **مادهٔ نوع p** را به بار می‌آورند که در آن حفره‌ها عامل اکثریت‌اند. در مادهٔ نوع p که در آن پذیرنده‌ها بیش از بخشنده‌ها هستند، تراز فرمی در صفر مطلق برتر از پذیرنده منطبق است $\mu = E_A$، و نتیجهٔ متناظر با معادلهٔ (۵-۲۹) به قرار زیر است

$$p \approx N_V\, e^{-E_A/k_B T} \quad \text{برای} \quad k_B T \ll E_A \qquad (۳۰-۵)$$

در مورد مادهٔ نوع n، با افزایش دما تعداد بخشنده‌های یونیده با تعداد کل بخشنده‌ها قابل مقایسه می‌گردد؛ و از آنجا که تراز بخشنده باید دراین صورت در دم تابع توزیع فرمی باشد، تراز فرمی در زیر تراز بخشنده قرار می‌گیرد. بنابراین یک گسترهٔ دمایی داریم که در آن اساساً تمامی

بخشنده‌ها و پذیرنده‌ها یونیده‌اند و با استفاده از معادلهٔ (۵-۲۶) چگالی الکترونی برابر است با

$$n = N_D - N_A \qquad (۵\text{-}۳۱)$$

با مساوی قرار دادن مقادیر n از معادلات (۵-۱۶) و (۵-۳۱) تراز فرمی به دست می‌آید.

$$\mu = E_G - k_B\, T\, ln \left(\frac{N_c}{N_D - N_A}\right) \qquad (۵\text{-}۳۲)$$

ترازهای آلاینده در اکثر قطعات نیمرسانا، آن چنانند که در دمای اتاق در ناحیه‌ای قرار می‌گیرند که در آن تمامی ناخالصی‌ها یونیده‌اند[1]؛ عدم وابستگی دمایی حاصل در تراکم حامل اکثریت اغلب برای کارکرد موفق قطعهٔ نیمرسانا اهمیت دارد. تراکم حامل اقلیت وابسته به دما در این ناحیه را می‌توان با استفاده از قانون اثر جرم، معادلهٔ (۵-۲۲)، به دست آورد.

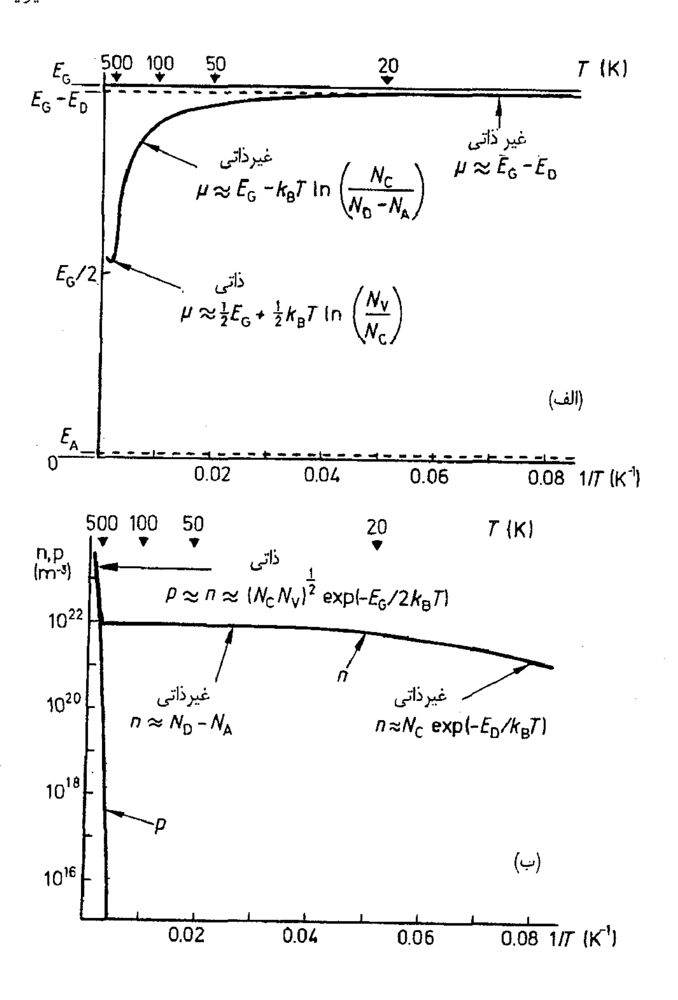
اگر دمای یک نیمرسانای نوع n را باز هم افزایش دهیم، تراکم حفره به سوی تراکم الکترون افزایش یافته، تراز فرمی به سوی مرکز گاف تنزّل می‌یابد و سرانجام رفتار ذاتی مشاهده می‌شود. به این ترتیب وابستگی‌های دمایی پتانسیل شیمیایی و تراکمهای حاملها در نیمرسانای نوع n به صورتی است که در شکل (۵-۶) نشان داده شده است. در ناحیه‌ای که تراکمها توسط ناخالصیها تعیین می‌شوند رفتار نیمرسانا را ***غیر ذاتی*** گویند. در مورد یک نیمرسانای نوع -p نتایج مربوط به معادلات (۵-۳۱) و (۵-۳۲) برای تراکم حفره و پتانسیل شیمیایی در گسترهٔ دمایی که در آن تمامی پذیرنده‌ها و بخشنده‌ها یونیده‌اند به قرار زیر است

$$p = N_A - N_D \qquad (۵\text{-}۳۳)$$

$$\mu = k_B\, T\, ln \left(\frac{N_V}{N_A - N_D}\right) \qquad (۵\text{-}۳۴)$$

اگر فقط یک نوع ناخالصی وجود داشته باشد رفتار دْر دمای بسیار پایین تفاوت خواهد داشت. اگر فقط بخشنده‌ها حضور داشته باشند، در صفر مطلق و همین طور در دماهای بسیار پایین‌تر، تراز بخشنده کاملاً پر است. در نتیجه تراز فرمی باید بین تراز بخشنده و نوار رسانش قرار گیرد؛ این وضعیت مشابه مادهٔ ذاتی‌است، به جز آنکه تراز بخشنده جای نوار ظرفیت را می‌گیرد. بنابراین، با تقریب زدن معادلهٔ (۵-۲۷) به همان روشی که برای به دست آوردن معادلهٔ (۵-۱۹)

۱- با وجودی که انرژیهای یونش بخشنده و پذیرنده با k_BT قابل مقایسه‌اند (جدول ۵-۱)، تمامی بخشنده‌ها و پذیرنده‌ها یونیده‌اند زیرا چگالیهای موثر حالتها در نوارهای رسانش و ظرفیت، N_C و N_V، از تراکمهای ناخالصی بسیار بزرگترند.



شکل ۵-۶ (الف) : تغییرات تراز فرمی μ و (ب) تغییرات تراکمهای الکترون و حفره بر حسب $1/T$ برای یک نیمرسانای نوع n که دارای تعداد قابل ملاحظه‌ای از ناخالصیهای پذیرنده است (به مقیاس لگاریتمی توجه کنید). نمودار برای نیمرسانای ژرمانیوم با $N_D = 10^{22} m^{-3}$، $E_D = 0/012 eV$، $N_A = 10^{21} m^{-3}$ و $E_A = 0/010 eV$ محاسبه شده است؛ مقیاس بالایی نمایشگر مقادیر دما در این مورد است.

به کار بردیم، چنین حاصل می‌شود

$$N_D^+ \approx N_D \; e^{(E_G - E_D - \mu)/k_B T} \qquad (۳۵\text{-}۵)$$

از غلظت حفره می‌توان چشم پوشی کرد، به طوری که خنثایی الکتریکی (معادلهٔ(۵-۲۶)) ایجاب می‌کندکه $n=N_D^+$ بنابراین، با استفاده از معادلات (۵-۱۶) و (۵-۳۵)، داریم

$$n=(N_C N_D)^{1/2} e^{-E_D / 2k_B T} \tag{۵-۳۶}$$

نماهای معادلات (۵-۲۹) و (۵-۳۶) به اندازه یک ضریب ۲ با یکدیگر تفاوت دارند، لذا مقادیر قابل ملاحظه‌ای از ناخالصی اقلیت در دماهای بسیار پایین دارای اثر قابل توجهی هستند.

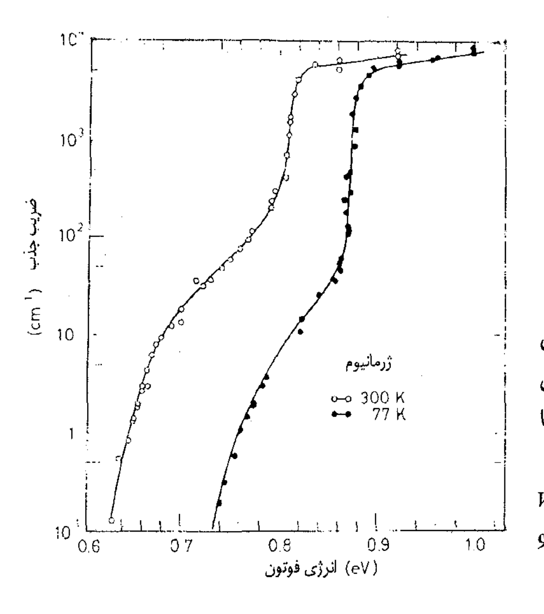
۵-۴ جذب تابش الکترومغناطیسی

شکل ۵-۷ نمایشگر ضریب جذب تابش الکترومغناطیسی به صورت تابعی از انرژی (بسامد) فوتون برای ژرمانیوم در دو دمای متفاوت است. در $T=77K$، با افزایش انرژی فوتون یک آستانهٔ جذب در حوالی $0/73eV$ و یک افزایش ناگهانی دیگر در جذب انرژی $0/87eV$ وجود دارد. این افزایشها در جذب به هنگامی رخ می‌دهند که فوتونها انرژی کافی برای برانگیختن یک الکترون نوار ظرفیت به نوار رسانش و ایجاد یک زوج الکترون- حفره دراین فرایند داشته باشند. به این ترتیب انرژیهای فوتون در آستانهٔ جذب مقیاسی برای گاف انرژی در نیمرساناها فراهم می‌سازد.

برای درک اینکه چرا در ژرمانیوم ظاهراً دو گاف انرژی وجود دارد، لازم است بدانیم که چرا ژرمانیوم (مانند سیلیسیم) **یک نیمرسانای با گاف (نواری) غیر مستقیم** است که در آن بیشینهٔ نوار ظرفیت و کمینهٔ نوار رسانش در مقادیر مختلف $\mathbf{k}$ رخ می‌دهند. بیشینهٔ نوار ظرفیت در $\mathbf{k}=0$ است ولی کمینهٔ نوار رسانش دریک بردار $\mathbf{k}$ در مرز منطقهٔ بریلوئن در جهت [۱۱۱] قرار دارد. این موضوع در شکل ۵-۸ (الف) نمایش داده شده است. این شکل روابط پاشندگی الکترون را برای ژرمانیوم ، برای $\mathbf{k}$ در جهت [۱۱۱] نشان می‌دهد. انرژی آستانهٔ پایین‌تر برای جذب فوتون، همان طوری که در شکل نشان داده شده است؛ با تقریب خوبی به کمینهٔ اختلاف انرژی بین دو نوار، E_G، مربوط است. انرژی آستانهٔ بالاتر به کمینهٔ انرژی‌ای مربوط می‌شود که در آن یک الکترون می‌تواند بدون هیچ تغییری در عدد موج به نوار رسانش ارتقاء یابد؛ این انرژی در شکل با E_G' نشان داده شده است. وقتی الکترون یک فوتون جذب می‌کند، انرژی و اندازه حرکت باید پایسته بماند. بنابراین تغییر در انرژی $\Delta\varepsilon$ و تغییر در اندازه حرکت (بلوری) $\hbar\Delta\mathbf{k}$ برای الکترون عبارت‌اند از

$$\Delta\varepsilon=\hbar\omega_{ph} \quad \text{و} \quad \hbar\Delta\mathbf{k}=\hbar\mathbf{k}_{ph}$$

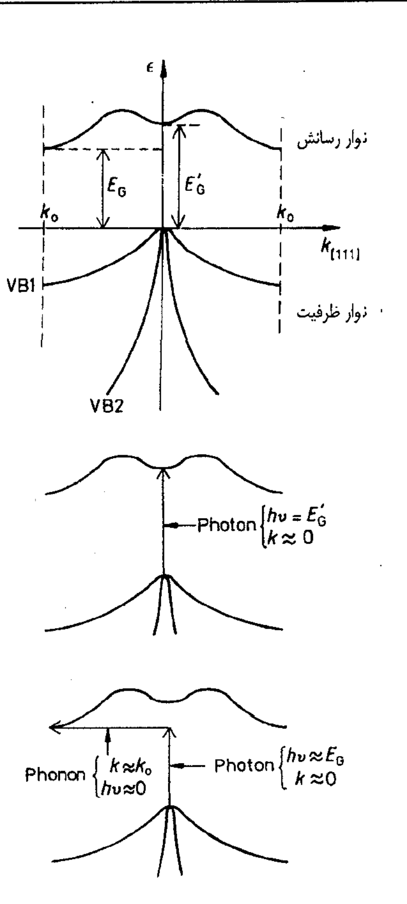
که در آن ω_{ph} بسامد زاویه‌ای فوتون و $\mathbf{k}_{ph}$ بردار موج آن است. در مورد فوتونی با انرژی $1eV$ ، طول موج در حدود $10^{-6}m$ است و بنابراین به مراتب بزرگتر از فاصلهٔ بین اتمی R



شکل ۵-۷: ضریب جذب ژرمانیوم برای تابش الکترومغناطیسی بر حسب انرژی فوتون در دماهای $77K$ و $300K$ (با اجازه از دبلیو. سی. دش و آر. نیومن *W.C. Dash and R.Newman, Phys. Rev.* **99**, *1151 (1955))*

است. به این ترتیب اندازه حرکت فوتون، h/λ، خیلی کوچکتر از h/R است، که مرتبهٔ بزرگی اندازه حرکت یک الکترون در نوار رسانش است. لذا فوتونهای با انرژی در حدود ۱eV نمی‌توانند تغییرات قابل توجهی در اندازه حرکت الکترونها ایجاد کنند و همان‌طور که در شکل ۵-۸ (ب) نشان داده شده است، گذارها عملاً قائم‌اند. انرژی آستانه برای چنین گذارهایی برابر کمینهٔ اختلاف قائم بین نوارهای ظرفیت و رسانش است و این امر، انرژیهای آستانه بالاتر در شکل ۵-۷ را توجیه می‌کند.

فوتونهای با انرژی بین E_G و E_G' دیگر چرا جذب می‌شوند؟ روشن است که باید یک چشمه (یا چاهکی) از اندازه حرکت درون بلور موجود باشد. کوانتومهای ارتعاشات شبکه، فونونها، این چشمه یا (چاهک) را فراهم می‌سازند؛ فونونها بر خلاف فوتونها دارای اندازه حرکت‌های بزرگ و انرژی کوچکند. فونونی با اندازه حرکت h/R دارای انرژی از مرتبهٔ $k_B\ \theta_D$ است که در آن θ_D دمای دبی است (بخش ۲-۶-۴)، و این انرژی معمولاً در مقایسه با ۱eV بسیار کوچک است. برای توضیح انرژی آستانهٔ پایین‌تر در شکل ۵-۷ فرایندی مانند آنکه در شکل ۵-۸ (ج) نشان داده شده است را درنظر می‌گیریم که در آن الکترون به طور همزمان یک فوتون جذب و یک فونون گسیل (یا جذب) می‌کند. فوتون تغییر انرژی الکترون و فونون تغییر اندازهٔ حرکت را فراهم می‌سازد. در نظریهٔ اختلال وابسته به زمان، چنین فرایندی در مرتبهٔ دوم پدیدار می‌شود. در حالی که فرایندی که فقط شامل یک فوتون است در مرتبهٔ اول ظاهر می‌شود و این بیان می‌کند که چرا آستانهٔ جذب در $\hbar\omega_{ph}=E_G$ از آستانهٔ جذب در $\hbar\omega_{ph}=E_G'$



(الف) روابط پاشندگی برای نوارهای رسانش و ظرفیت ژرمانیوم برای $\mathbf{k}$ در جهت [۱۱۱]. E_G کمینهٔ اختلاف انرژی بین دو نوار است. $E_G^{'}$ کمینهٔ فاصلهٔ قائم است. دونوارظرفیت V_{B1} و V_{B2} دربیشینهٔ انرژی تبهگن‌اند و به حفره‌هایی با دو جرم مؤثر متفاوت منجر می‌شوند.

(ب) گذار قائم یک الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش ناشی از جذب یک فوتون با انرژی $E_G^{'}$ ؛ تغییر حاصل در اندازه حرکت توسط چنین فوتونی بسیار کوچک است.

(ج) جذب همزمان یک فوتون و یک فونون به ترتیب انرژی E_G و اندازه حرکت $\hbar k_0$ را فراهم می‌کند، تا الکترون را قادر به انجام‌گذاری از بیشینهٔ نوار ظرفیت به کمینهٔ نوار رسانش سازد.

شکل ۵-۸

کمتر چشمگیر است. **در نیمرسانای با گاف (نواری) مستقیم**، *InSb*، که در آن بیشینهٔ نوار ظرفیت و کمینهٔ نوار رسانش در یک مقدار $\mathbf{k}$ رخ می‌دهد، فقط یک انرژی آستانه مشاهده می‌شود.

بنابراین طیف جذبی یک نیمرسانا، روشی مستقیم برای اندازه‌گیری گاف انرژی فراهم می‌سازد. از شکل ۵-۷ واضح است که گاف انرژی و بنابراین انرژیهای الکترون به دما بستگی دارد. این وابستگی دمایی دو علّت دارد: انبساط گرمایی ، فاصله بین اتمی و بنابراین پتانسیل شبکه را تغییر می‌دهد؛ همچنین انرژیهای الکترون به دلیل حضور ارتعاشات شبکه که به طور گرمایی برانگیخته می‌شوند تغییر می‌کنند.

۵-۵ خواص ترابردی

برای توصیف حرکت حاملها در حضور میدانهای الکتریکی و مغناطیسی معادلهٔ (۳-۲۳) را برای الکترونها و معادلهٔ (۵-۹) را برای حفره‌ها به کار می‌بریم. برای سهولت مراجعه، این

معادلات را بار دیگر در اینجا می‌نویسیم و به آن شماره می‌دهیم.

$$m_e = \left(\frac{d\mathbf{v}_e}{dt} + \frac{\mathbf{v}_e}{\tau_e}\right) = -e\mathbf{E} - e\mathbf{v}_e \times \mathbf{B} \quad \text{(۵-۳۷ الف)}$$

$$m_h = \left(\frac{d\mathbf{v}_h}{dt} + \frac{\mathbf{v}_h}{\tau_h}\right) = -e\mathbf{E} - e\mathbf{v}_h \times \mathbf{B} \quad \text{(۵-۳۷ ب)}$$

۵-۵-۱ رسانندگی الکتریکی

وقتی فقط یک میدان الکتریکی dc وجود داشته باشد جوابهای معادلات (۵-۳۷) عبارتند از

$$\mathbf{v}_e = -\frac{e\tau_e}{m_e}\mathbf{E} = -\mu_e \mathbf{E} \quad \text{(۵-۳۸ الف)}$$

$$\mathbf{v}_h = \frac{e\tau_h}{m_h}\mathbf{E} = \mu_h \mathbf{E} \quad \text{(۵-۳۸ ب)}$$

(معادلهٔ ((۳-۲۴) را ببینید)، که تحرکهای الکترون و حفره را به قرار زیر می‌دهد

$$\mu_e = \frac{e\tau_e}{m_e} \quad \text{و} \quad \mu_h = \frac{e\tau_h}{m_h} \quad \text{(۵-۳۹)}$$

چگالی جریان الکتریکی حاصل، که با جمع زدن سهمهای الکترونی و حفره‌ای به دست می‌آید، عبارت است از

$$\mathbf{j} = ne\mathbf{v}_e + pe\mathbf{v}_h = \left(\frac{ne^2\tau_e}{m_e} + \frac{pe^2\tau_h}{m_h}\right)\mathbf{E}$$

$$= (ne\mu_e + pe\mu_h)\mathbf{E} = \sigma\mathbf{E} \quad \text{(۵-۴۰)}$$

که قانون اهم است و رسانندگی الکتریکی σ توسط رابطهٔ زیر بیان می‌شود.

$$\sigma = ne\mu_e + pe\mu_h \quad \text{(۵-۴۱)}$$

از آنجا که تحرکهای الکترون و حفره معمولاً قابل مقایسه‌اند، نسبت چگالیهای حاملها، نسبت سهمهای الکترونها و حفره‌ها در رسانندگی را تعیین می‌کنند. در ناحیهٔ ذاتی این دو سهم معمولاً یکسانند، ولی در ناحیهٔ غیرذاتی رسانندگی عمدتاً توسط حامل اکثریت تعیین می‌شود.

رسانندگی‌های اندازه‌گیری شده برای ژرمانیوم نوع n که با آلایش ارسنیک در مقیاس لگاریتمی بر حسب $1/T$ در شکل (۵-۹) رسم شده‌اند. افزایش تند σ در دماهای بالا، که فقط در

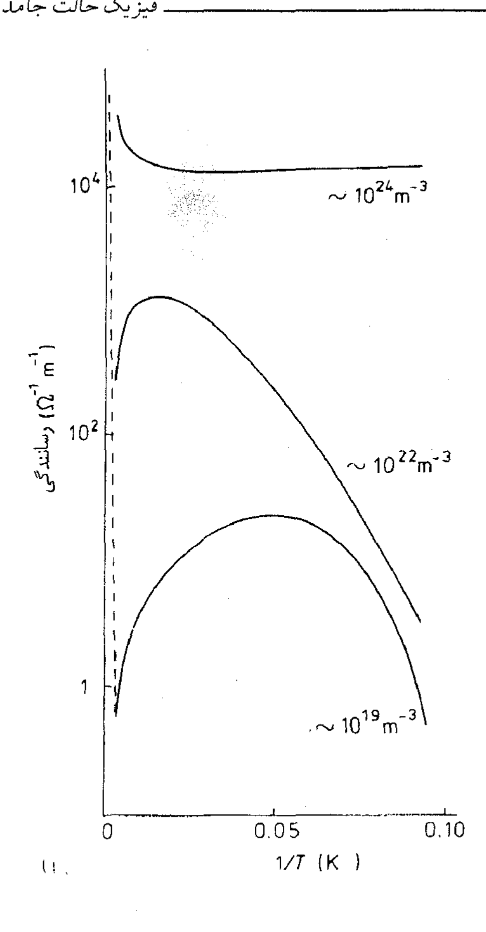
خالص‌ترین نمونه مشاهده شد، توسط خط‌چین در طرف چپ نشان داده شده است که نمایشگر افزایش n و p مربوط به گذار رفتار ذاتی است (معادلهٔ (۵-۲۳)). افت σ در دماهای پایین در طرف راست شکل برای دو تا از خالص‌ترین نمونه‌ها، به یخ زدن الکترونهای واقع بر ترازهای دهنده مربوط می‌شود؛ از آنجا که شیب‌های این دو منحنی تقریباً به اندازهٔ یک ضریب ۲ با هم تفاوت دارند، اغوا کننده است که منحنی بالاتر را به معادلهٔ (۵-۳۶) و منحنی پایین‌تر را به معادلهٔ (۵-۲۹) مربوط سازیم (مسئلهٔ ۵-۴ را ببینید). در دماهای متوسط بخشنده‌ها کاملاً یونیده می‌شوند و کاهش مشاهده شده در رسانندگی با افزایش دما، ناشی از کاهش تحرک الکترون است که به علت افزایش پراکندگی توسط ارتعاشات شبکه که به طور گرمایی برانگیخته می‌شوند به وجود می‌آید.

ناخالص‌ترین نمونه رفتاری نشان می‌دهد که از نظر کیفی متفاوت است. رسانندگی در پایین‌ترین دماها، درست مانند فلزات، مستقل از دماست. همان طوری که در بخش ۵-۳-۱ بحث کردیم، تراکم ناخالصی دراین نمونه طوری است که در آن توابع موج پایین‌ترین حالت مقید مربوط به اتمهای بخشندهٔ مجاور شروع به همپوشی می‌کنند. این امر باعث تشکیل یک نوار انرژی ″ناخالصی″ از حالتهای الکترون متحرک می‌شود (بخش ۱۳-۵-۶) در نتیجه الکترونهای ترازهای بخشنده می‌توانند الکتریسیته را هدایت کنند، که این منجر به تراکم حامل مستقل از دما در دمای پایین می‌شود. تشکیل یک نوار انرژی ناخالصی مربوط به اتمهای بخشنده که از نظر فضایی بی نظم هستند نمایشگر آن است که نظم بلورین برای حضور حالتهای الکترونی متحرک ضروری نیست؛ وجود فلزات مایع مثال متقاعد کننده‌تری برای این حقیقت است.

مرتبهٔ بزرگ رسانندگیهای نشان داده شده در شکل ۵-۹ را می‌توان به طور تقریبی توجیه کرد. یک دمای نسبتاً پایین ($۵۰K$) و نمونه‌ای با ناخالصی متوسط را اختیار می‌کنیم، در نتیجه می‌توانیم انتظار داشته باشیم که پراکندگی بیشتر ناشی از ناخالصیها، که در این دما ۱۰۰٪ یونیده‌اند، باشد. بنابراین رسانندگی تجربی برای $n = ۱۰^{۲۲} m^{-۳}$ از مرتبهٔ $۱۰^{۳} \Omega^{-۱} m^{-۱}$ است. لذا با استفاده از معادلهٔ (۵-۴۰)، با $e \approx ۱۰^{-۱۹} C$، تحرک نوعی از مرتبهٔ $۱ m^{۲} V^{-۱} s^{-۱}$ است، و با استفاده از معادلهٔ (۵-۳۹) با $m_e = ۱۰^{-۳۱}\ kg$، زمان برخورد نوعی برابر $\tau_e = ۱۰^{-۱۲} s$ است. می‌توانیم این زمان را به سطح مقطع برخورد Aی یک ناخالصی مربوط کنیم. با به کار بردن نظریهٔ جنبشی مقدماتی برای مسافت آزاد میانگین داریم (بخش ۶-۴-۱ کتاب فلاورز و مندوزا)

$$e = ۱/N_D\ A \qquad \textbf{(۴۲-۵)}$$

تراکم ناخالصی را برابر تراکم بخشنده گرفته‌ایم. مسافت آزاد میانگین l توسط رابطهٔ زیر به زمان



شکل ۵-۹: وابستگی دمایی رسانندگی سه نمونهٔ ژرمانیوم حاوی ناخالصی‌های بخشندهٔ ارسنیک با تراکمهای تقریبی نشان داده شده (گزارش شده با اجازه از پی .پی. دبی و ای. ام. کانول

P.P.Debye and E.M. Conwell, Phys. Rev. **93**, *993 (1954))*

پراکندگی مربوط می‌شود

$$\tau = l/\overline{v}_e$$

که در آن $\overline{v}_e$ سرعت گروه میانگین الکترونهاست؛ این سرعت را برابر $(3k_B\ T/2m_e)^{1/2}$ می‌گیریم زیرا همان طوری که قبلاً نشان داده‌ایم همیاری انرژی را می‌توان برای الکترونهای نوار رسانش به کاربرد. بنابراین با استفاده از مقدار تجربی τ_e و برای $N_D = 10^{22}m^{-3}$، $m_e = 10^{-31}\ kg$ و $T = 50K$ نتیجه می‌گیریم

$$A = \frac{1}{N_D l} = \frac{1}{N_D\ \overline{v}_e\ \tau_e} = \frac{1}{N_D\ \tau_e}\ \left(\frac{2m_e}{3k_B\ T}\right)^{1/2} \approx 10^{-15}\ m^2$$

بنابراین یک ناخالصی دارای قطر برخوردی برابر $3 \times 10^{-8}\ m\ (= 300\ \text{Å})$ است که در مقیاس اتمی بزرگ است. با توجه به آنکه بخشنده‌ها یونیده‌اند، پراکندگی کولنی مسئول این سطح مقطع است. برای به دست آوردن مقدار دقیق A می‌توان از فرمول پراکندگی رادفورد

استفاده کرد، ولی برای منظوری که داریم می‌توانیم با فرض اینکه شعاعی که درون آن پراکندگی قابل ملاحظه است شعاعی است که در آن انرژی پتانسیل کولنی ($e^{۲}/۴\pi\varepsilon_{۰}\varepsilon r$) با انرژی جنبشی الکترون فرودی ($۳k_B T/۲$) برابر است، تخمین خامی به عمل آوریم. به این ترتیب برای $\varepsilon \approx ۱۰$، داریم

$$r=\frac{e^{۲}}{۴\pi\varepsilon_{۰}\varepsilon k_B T}\approx ۱۰^{-۸}\ m=۱۰۰\ \text{Å}$$

در نتیجه قطر برخورد در حدود Å ۲۰۰ است، که با تخمین خام ماتز رسانندگی سازگار است. توجه کنید، که بر خلاف فلز، در نیمرسانا، چون سرعت الکترون و سطح مقطع پراکندگی وابسته به دما هستند، سهم پراکندگی ناخالصی در مقاومت ویژهٔ کل وابسته به دماست.

۵-۵-۲ اثر هال

قبلاً در بخش ۵-۳-۳ ضریب هال R_H را با تعیین میدان الکتریکی تولید شدهٔ عمود بر شارش جریان اعمالی **j** و بر میدان مغناطیسی **B** از طریق معادلهٔ (۳-۳۶) تعریف کردیم، یعنی

$$\mathbf{E_H}=R_H\,\mathbf{B}\times\mathbf{j}$$

همچنین مقدار آن را برای یک فلز الکترون آزاد محاسبه کردیم. در نیمرسانا، که در آن دو نوع حامل وجود دارد، محاسبه پیچیده‌تر است. ولی اغلب چگالی یک نوع حامل به مراتب بزرگتر از چگالی حامل نوع دیگر است و لذا می‌توان محاسبهٔ بخش ۵-۳-۳ را مستقیماً به‌کاربرد و نتایج زیر را به دست آورد[1]

$$R_H=-\frac{۱}{ne}$$ در نیمرسانای نوع n ($n\gg p$)

$$R_H=+\frac{۱}{ne}$$ در نیمرسانای نوع p ($p\gg n$)

بنابراین علامت اثر هال توسط علامت حامل بار اکثریت تعیین می‌شود و اندازه‌گیری R_H تعیین تراکم حامل بار را ممکن می‌سازد. با ترکیب معادلات (۵-۴۱) و (۵-۴۳) در می‌یابیم که اندازه‌گیریهای همزمان σ و R_H تعیین تحرک حامل را از رابطهٔ زیر امکان پذیر می‌سازد.

$$\mu=|R_H|\,\sigma \qquad \text{(۵-۴۴)}$$

۱- این نتایج براساس این فرض ما که برای هرنوع حامل یک تک زمان و اهلش مستقل از سرعت حامل وجود دارد به دست می‌آیند؛ شکست این فرض می‌تواند معادلات (۵-۴۳) را با ضرایبی از مرتبهٔ واحد تعدیل کند، و باعث شود که با تغییر میدان مغناطیسی، تغییری در مقاومت ویژه اندازه‌گیری شده در جهت جریان به بار آید، پدیده‌ای که به عنوان مغناطو مقاومت مشهور است.

فرض کرده‌ایم که رسانندگی نیز به طور عمده توسط حامل اکثریت صورت می‌گیرد.

برای مثالی که در بخش قبل بررسی شده داریم

$$R_H = \frac{1}{ne} \approx \frac{1}{10^{22} \times 10^{-19}} = 10^{-3}\ \Omega m T^{-1}$$

که در مقایسه با مقاومت ویژه $1/\sigma = 10^{-3}\ \Omega m$ می‌بینیم که میدانهای الکتریکی اهمی و هال در یک میدان یک تسلایی با یکدیگر مساویند. در این میدان مغناطیسی میدان الکتریکی کل با جهت جریان زاویه °۴۵ می‌سازد، یعنی **زاویهٔ هال** °۴۵ است. این میدان مغناطیسی، **میدان هال** B_0، مقیاس مفیدی است برای اندازه‌گیری شدت اثر هال (هر چه B_0 کوچکتر باشد، اثر هال بزرگتر است)؛ با استفاده از محاسبهٔ فوق می‌بینیم که B_0 توسط رابطهٔ زیر داده می‌شود.

$$B_0 = \frac{1}{|R_H|\sigma} = \frac{1}{\mu}$$

چگالی حامل کوچکتر در نیمرسانا به این معناست که اثر هال در نیمرسانا بزرگتر از فلزات است (مسئلهٔ ۵-۵) را ببینید این موضوع نیمرساناها را برای ساختن **گمانهٔ هال** به منظور اندازه‌گیری میدانهای مغناطیسی مفید می‌سازد. هر چند مطلوب آن است که در سرتاسر گسترهٔ عمل، تراکم حامل مستقل از دما باشد (*تمامی* ناخالصی‌ها یونیده و حاملهای ذاتی قابل چشم پوشی باشند)، ولی ماده‌ای که نسبتاً اندکی آلاییده شده باشد بزرگترین حساسیت را نشان می‌دهد.

وقتی الکترونها و حفره‌ها هر دو به تعداد قابل ملاحظه‌ای وجود داشته باشند، برای مثال در ناحیهٔ ذاتی، محاسبهٔ ضریب هال پیچیده‌تر است. جوابهای حالت مانای معادلات (۵-۳۷) عبارتند از

$$\mathbf{v}_e = -\frac{e\tau_e}{m_e}(\mathbf{E} + \mathbf{v}_e \times \mathbf{B}) = -\mu_e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_e \times \mathbf{B})$$

$$\mathbf{v}_h = \frac{e\tau_h}{m_h}(\mathbf{E} + \mathbf{v}_h \times \mathbf{B}) = \mu_h(\mathbf{E} + \mathbf{v}_h \times \mathbf{B}) \qquad (۵\text{-}۴۵)$$

بنابراین چگالی جریان $\mathbf{j}$ به قرار زیر است.

$$\mathbf{j} = -ne\mathbf{v}_e + pe\mathbf{v}_h = ne\mu_e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_e \times \mathbf{B}) + pe\mu_h(\mathbf{E} + \mathbf{v}_h \times \mathbf{B}) \qquad (۵\text{-}۴۶)$$

ترتیب تجربی شکل ۳-۱۲ را در نظر می‌گیریم که در آن جریان در امتداد x شارش می‌کند، میدان مغناطیسی در امتداد z اعمال می‌شود و میدان هال در امتداد y پدیدار می‌گردد. شرایط مرزی دراین ترتیب هندسی ایجاب می‌کند که $\mathbf{j}_y = 0$، ولی این به آن معنا نیست که هریک از

جریانهای حفره و الکترون در این جهت صفرند، بلکه این جریانها با یکدیگر مساوی و در جهتهای مخالفند.

برای سهولت، محاسبه را به میدانهای مغناطیسی کوچک محدود می‌کنیم. اگر توجه داشته باشیم که مؤلفه‌های y سرعتهای حامل برحسب B خطی‌اند و فقط در جملات تا مرتبهٔ اول بر حسب B را نگه داریم، آنگاه با استفاده از معادلهٔ (۵-۴۶) داریم

$$i_x = eE_x \,(n\mu_e + p\mu_h) \quad \text{(۵-۴۷ الف)}$$

و

$$j_y = 0 = eE_y \,(n\mu_e + p\mu_h) - eB_z \,(n\mu_e v_{ex} + p\mu_h v_{hx})$$

$$= eE_y \,(n\mu_e + p\mu_h) + eB_z E_x \,(n\mu_e^2 - p\mu_h^2) \quad \text{(۵-۴۷ ب)}$$

که در آن برای به دست آوردن سطر آخر از معادلهٔ (۵-۴۵)استفاده کرده‌ایم. حذف E_x بین این دو معادله نتیجه می‌دهد

$$E_y = -\frac{j_x B_z \,(n\mu_e^2 - p\mu_h^2)}{e\,(n\mu_e - p\mu_h)^2} \quad \text{(۵-۴۸)}$$

بنابراین با استفاده از تعریف ضریب هال (معادلهٔ (۳-۳۶)) داریم

$$R_H = \frac{(p\mu_h^2 - n\mu_e^2)}{e\,(p\mu_h + n\mu_e)^2} \quad \text{(۵-۴۹)}$$

بنابراین حامل اقلیت، به شرط اینکه تحرکش به اندازهٔ کافی بزرگ باشد، می‌تواند علامت ضریب هال را معیّن کند.

جالب توجه است که بزرگی جریانهای مساوی و مخالف الکترون و حفره را در جهت y محاسبه کنیم. در نتیجه، با استفاده از معادلات (۵-۴۷) و (۵-۴۸) داریم

$$j_{ey} = -j_{hy} = n\mu_e \, e\,(E_y + \mu_e E_x B_z)$$

$$= n\mu_e \, eE_x B_z \left(\frac{p\mu_h^2 - n\mu_e^2}{p\mu_h + n\mu_e} + \mu_e\right)$$

$$= j_x B_z \,(\mu_e + \mu_h)\frac{\sigma_e \sigma_h}{(\sigma_e + \sigma_h)^2} \quad \text{(۵-۵۰)}$$

که در آن $\sigma_e\ (= ne\mu_e)$ و $\sigma_h\ (= p_e\mu_h)$ سهمهای الکترون و حفره در رسانندگی‌اند. معادلهٔ

(۵-۵۰) نمایشگر آن است که شمارش مانایی از الکترونها و حفره‌ها در جهت منفی y وجود دارد، که وقتی رسانندگی‌های الکترون و حفره با هم قابل مقایسه باشند، بزرگترین مقدار را داراست. این نشانگر آفرینش زوجهای الکترون- حفره و جذب انرژی در یک طرف نمونه و نابودی متقابل آنها و رهایی انرژی در طرف دیگر نمونه است. در نتیجه یک شیب دمایی عرضی معروف **به اثر اتینگهاؤزن** به وجود می‌آید؛ چنین اثری نشانگر حضور دو نوع حامل است.

اگر در محاسبهٔ مرتبه‌های بالاتر B نیز منظور شود، آنگاه مقاومتی که در راستای شارش جریان اندازه‌گیری می‌شود تابع میدان مغناطیسی خواهد بود. در میدانهای کوچک مغناطو مقاومت تابع درجهٔ دومی از میدان است (صفحه ۱۱۴ از کتاب اسمیت).

۵-۵-۳ تشدید سیکلوترونی

سیکلوترون ماشینی است که برای شتاب دادن ذرات باردار به کار می‌رود؛ کار آن به این حقیقت بستگی قاطع دارد که در یک میدان مغناطیسی ثابت dc، ذرات غیر نسبیتی به جرم m در مدارهای دایره‌ای، با بسامد زاویه‌ای $\omega_c = eB/m$ که مستقل از انرژی آنهاست حرکت می‌کنند، و بنابراین در این بسامد می‌توانند از یک میدان الکتریکی ac با فاز مناسب انرژی جذب کنند. در نیمرساناها نیز همین اصل به کار می‌رود و ، با اندازه‌گیری بسامدهای سیکلوترونی که در آنها جذب انرژی از میدانهای الکتریکی ac رخ می‌دهد، تعیین جرمهای مؤثر حاملها امکان پذیر است. برای یک نوع حامل، مثلاً حفره‌ها، می‌توان وضعیت را با نوشتن معادلهٔ (۵-۳۷ ب) به شکل مؤلفه‌ای برای b در جهت z و E در صفحهٔ xy تحلیل کرد:

$$\frac{dv_{hx}}{dt} + \frac{v_{hx}}{\tau_h} = \frac{e}{m_h} (E_x + v_y B)$$

$$\frac{dv_{hy}}{dt} + \frac{v_{hy}}{\tau_h} = \frac{e}{m_h} (E_y + v_x B)$$

تقارن این دو معادله مارا قادر می‌سازد که با جمع کردن i برابر معادلهٔ دوم با معادلهٔ اول و نوشتن $u = v_{hx} + iv_{hx}$ و $\mathscr{E} = E_x + iE_y$ [1] آنها را به یک معادله کاهش دهیم. این روش چنین نتیجه می‌دهد

$$\frac{du}{dt} + \frac{u}{\tau_h} = \frac{e}{m_h} (\mathscr{E} - iuB) \qquad (۵\text{-}۵۱)$$

۱- این قاعدهٔ عمومی را به کار برده‌ایم که بردارهای دو بعدی را می‌توان توسط اعداد مختلط در یک نمودار آرگاند نمایش داد.

فرض کنیم میدان الکتریکی ac به شکل $\mathscr{E}=\mathscr{E}_0\, e^{i\omega t}$ باشد؛ توجه کنید که این میدان متناظراست با یک موج قطبیدهٔ دایره‌ای، زیرا $E_x=\mathscr{E}_0 \cos(\omega t)$ و $E_y=\mathscr{E}_0 \sin(\omega t)$. میدان مغناطیسی این تابش در بسامدهای مورد نظر ما ناچیز است و از آن چشم‌پوشی خواهیم کرد. جواب u به شکل $u=u_0\, e^{i\omega t}$ است که در آن u_0 عموماً محتلط است. با درج این جواب در معادلهٔ (۵-۵۱) به دست می‌آوریم

$$\left(\frac{1}{\tau_h}+i\omega\right) u_0=\frac{e}{m_h}\,(\mathscr{E}_0-iu_0B)$$

یا

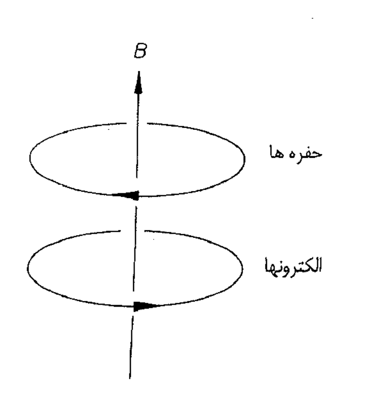
$$u_0=\frac{-ie\mathscr{E}_0}{m_h\,(\omega-\omega_c-i/\tau_h)} \qquad (۵\text{-}۵۲)$$

که در آن $\omega_c=-eB/m_h$ بسامد سیکلوترونی حفره‌هاست. علامت منها در ω_c معرّف دوران حفره‌ها حول میدان در جهتی است که در شکل ۵-۱۰ نشان داده شده است، و بنابراین معرّف جهت دوران میدان الکتریکی قطبیدهٔ دایره‌ای است که با حفره‌ها جفت خواهد شد. با این قرار داد علامتی که اتخاذ کرده‌ایم بسامد سیکلوترونی الکترونها مثبت می‌شود.

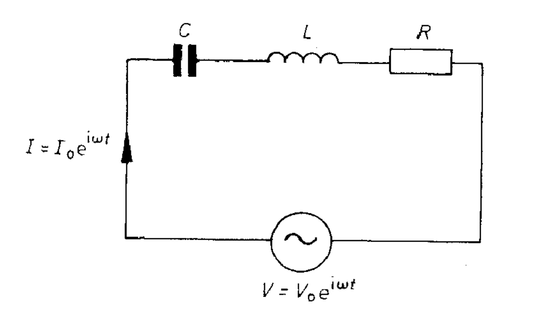
معادلهٔ (۵-۵۲) پاسخ حفره‌ها به میدان الکتریکی اعمالی رابیان می‌کند. برای تفسیر این معادله توجه داریم که پاسخ یک مدار متوالی $L\text{-}C\text{-}R$ به ولتاژ ac ی اعمالی به همین شکل است (صفحه ۲۶۸ از متن اصلی کتاب گرانت و فیلیپس). اگر جریان در مدار شکل ۵-۱۱ به صورت $I=I_0\, e^{i\omega t}$ باشد، برای بسامدهای نزدیک به بسامد تشدید $\omega_R\,(=1/(LC)^{1/2})$ و در حدّ ضریب کیفیت بزرگ، I_0 به شکل زیر نوشته می‌شود

$$I_0=\frac{-iV_0}{2L(\omega-\omega_R-i/\tau)} \qquad (۵\text{-}۵۳)$$

که در آن $\tau=2L/R$ ثابت زمانی میرایی نوسانانهای آزاد در مدار است، مدار $L\text{-}C\text{-}R$ در بسامد



شکل ۵-۱۰ جهتهای مدارهای سیکلوترونی الکترونها و حفره‌ها.

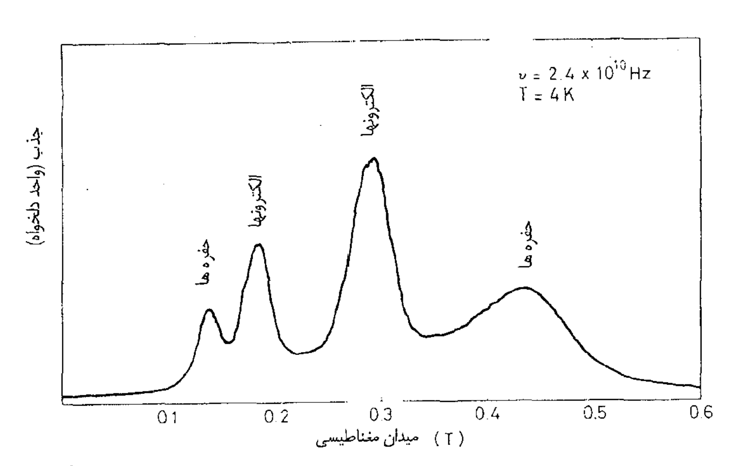


شکل ۵-۱۱: مدار L-C-R سری.

تشدیدی بیشینهٔ توان جذب را نشان می‌دهد، و در نتیجه مقایسهٔ معادلات (۵-۵۲) و (۵-۵۳) پیشنهاد می‌کند که باید بیشینهٔ جذب انرژی الکترومغناطیسی توسط نیمرسانا در بسامد سیکلوترونی رخ دهد.

برای یک تشدید نیز باید میرایی کوچک باشد و در مورد مدار L-C-R این ایجاب می‌کند که $\omega_R \tau \gg ۱$. شرط متناظر برای نیمرسانا $|\omega_c| \tau_h \gg ۱$ است، که این شرط درست به این معناست که حفره باید بین برخوردها چند مدار را تکمیل کند. حصول این شرط ساده نیست؛ آزمایشهای تشدید سیکلوترونی نوعاً در بسامدهای در حدود $۲۰ GH_z$ کار می‌کنند و بنابراین وقتی $\omega_c \tau \geq ۱$ است که داشته باشیم $\tau \geq ۱۰^{-۱۱} s$. زمانهای برخورد از این مرتبه، فقط در نیمرساناهای خالص در دماهای پایین، که پراکندگی توسط ارتعاشات شبکه کوچک است، حاصل می‌شوند. تحت چنین شرایطی، رسانندگی معمولاً آن قدر کوچک است که اثر پوستی الکترومغناطیسی از نفوذ میدان الکتریکی در نمونه جلوگیری به عمل نمی‌آورد، ولی تعداد حاملها در تعادل گرمایی آنقدر کوچک است که تشدید فقط در صورتی به آسانی قابل مشاهده است که این تعداد، برای مثال با تابانیدن نور با بسامد بزرگتر از E_G/h بر روی نیمرسانا، افزایش یابد.

تشدید اغلب توسط کاربرد تابش قطبیدهٔ تخت مشاهده می‌شود؛ چنین تابشی را می‌توان به منزلهٔ جمع نور قطبیدهٔ دایره‌ای راست و چپ در نظر گرفت، به همین دلیل این تابش، الکترونها و حفره را از یکدیگر تمیز نمی‌دهد. نتایج نوعی برای سیلیسیم در شکل ۵-۱۲ نشان داده شده است. می‌بینیم که چهار ستیغ جذب وجود دارد، دو ستیغ مربوط به حفره‌های با جرمهای مؤثر متفاوت هستند. وجود دو جرم مؤثر برای حفره‌ها این واقعیت را نشان می‌دهد که بیشینهٔ انرژی نوار ظرفیت سیلیسیم عملاً به صورت تک تراز تبهگن در دو نوار انرژی متفاوت با روابط پاشندگی الکترونی با انحنای متفاوت است (همان طوری که در شکل ۵-۸(الف) مشاهده می‌شود. ژرمانیوم نیز این خاصیت را نشان می‌دهد). دو جرم مؤثر برای الکترونها این واقعیت را نمایش



شکل ۵-۱۲: منحنی تشدید سیکلوترونی نوعی سیلیسیم. میدان در صفحهٔ (۱۱۰) قرار می‌گیرد و با محور [۰۰۱] زاویهٔ °۳۰ می‌سازد (با اجازه از جی درسلهاس، اِ. اف .کیپ و سی. کتیل

(D.Dresselhaus, A.F. Kip and C. Kittle, Phys. Rev. **98,** *368 (1955))*

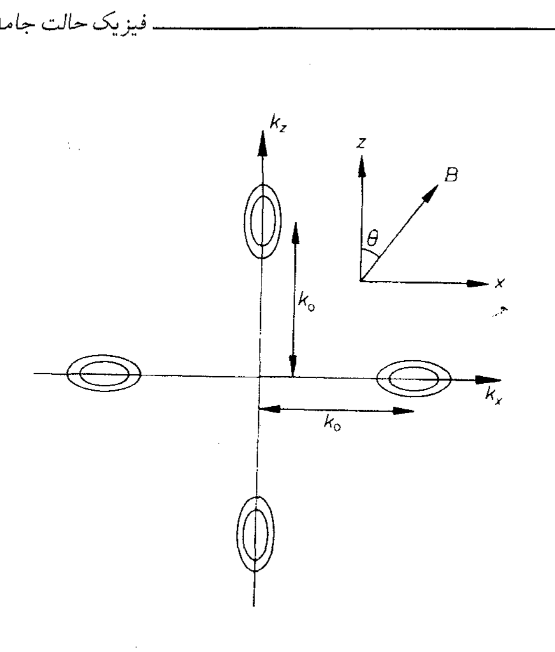
می‌دهد که رابطهٔ پاشندگی نوار رسانش در سیلیسیم ناهمسانگرد است؛ الکترونهایی که در جهتهای مختلف حرکت می‌کنند و دارای جرمهای مؤثر متفاوتند.

برای گسترش نظریهٔ تشدید سیکلوترونی که این امکان را نیز دربرگیرد نیاز داریم کمینهٔ نوار رسانش در سیلیسیم را بدانیم که در شش نقطهٔ تبهگن در فضای **k** واقع بر محورهای مختصات شکل ۵-۱۳ رخ می‌دهد. سطوح انرژی ثابت حول هر نقطه به صورت بیضیوارهای دواری است که در شکل نشان داده شده است . بنابراین اگر الکترونهایی راکه در نزدیکی $(\circ, \circ, k_\circ)$ واقع بر محور $+k_z$ قرار دارند در نظر بگیریم رابطهٔ پاشندگی به شکل زیر است

$$\varepsilon = \frac{\hbar^{2}}{2}\left(\frac{k_x^{2} + k_y^{2}}{m_T} + \frac{(k_z - k_\circ)^{2}}{m_L}\right) \tag{۵-۵۴}$$

که در آن زیر نویسهای T و L به محورهای عرضی و طولی بیضی‌وار مربوط می‌شوند. معادلهٔ (۵-۳۷(ب)) را نمی‌توان در محاسبهٔ دینامیک الکترونها به کاربرد زیرا در این معادله فرض بر وجود یک تک جرم مؤثر همسانگرد است . در عوض تعمیم سه بعدی معادلهٔ (۴-۲۴) را به کار می‌بریم. بنابراین معادلهٔ زیر را اختیار می‌کنیم.

$$\frac{\hbar d\mathbf{k}}{dt} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B} \tag{۵-۵۵}$$



شکل ۵-۱۳ : پر بندهای انرژی در فضای $\mathbf{k}$ در نزدیکی کمینهٔ نوار رسانش سیلیسیم. دو بستهٔ دیگر از الکترونهای نوار رسانش روی محور $\pm k_z$ یافت می‌شوند. در متن، تشدید سیکلوترونی الکترونهای واقع بر محور $\pm k_z$ را برای میدان مغناطیسی B در جهتی که نشان داده شده، حساب می‌کنیم.

که در آن از برخوردها و همچنین از میدان الکتریکی عامل حرکتهای سیکلوترونی چشم‌پوشی کرده‌ایم؛ این روش خود سازگار است زیرا، در غیاب میرایی توسط برخوردها، حرکتهای سیکلوترونی‌میرا نخواهد بود و در نتیجه جوابهای حالت مانای معادلهٔ (۵-۵۵) نیز باید میرا نباشند.

با استفاده از همتای سه بعدی معادلهٔ (۴-۲۲)، سرعت الکترون در معادلهٔ (۵-۵۵) به دست می‌آید.

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon \tag{۵-۵۶}$$

که بیان می‌کند $\mathbf{v}$ توسط شیب ε در فضای $\mathbf{k}$ تعیین می‌شود. لذا با استفاده از معادلات (۵-۵۴) و (۵-۵۶) برای الکترونهای نزدیک به کمینهٔ نوار رسانش در $(k_0, 0, 0)$ نتیجه می‌گیریم.

$$v_x = \frac{\hbar k_x}{m_T} \quad \text{و} \quad v_y = \frac{\hbar k_y}{m_T} \quad \text{و} \quad v_z = \frac{\hbar (k_z - k_0)}{m_L} \tag{۵-۵۷}$$

عامترین وضعیت برای الکترونها در این ناحیه از فضای $\mathbf{k}$ میدان مغناطیسی‌ای است که مطابق شکل ۵-۱۳ با محور بیضیوار زاویهٔ θ می‌سازد. برای سهولت B را در صفحهٔ xz اختیار می‌کنیم. با استفاده از معادلهٔ (۵-۵۷) می‌بینیم که مؤلفه‌های معادلهٔ (۵-۵۵) را می‌توان چنین نوشت.

$$\frac{\hbar dk_x}{dt} = -\frac{e \hbar B k_y}{m_T} \cos\theta$$

$$\frac{\hbar dk_y}{dt} = -\frac{e\hbar B\,k_x}{m_T}\cos\theta - \frac{e\hbar B(k_z - k_\circ)}{m_L}\sin\theta,$$

$$\hbar\frac{dk_z}{dy} = \frac{e\hbar B\,k_y}{m_T}\sin\theta$$

اگر در جستجوی یک جواب ارتعاشی به شکل زیر باشیم

$$k_x = k_1 e^{i\omega t} \quad , \quad k_y = k_2 e^{i\omega t} \quad , \quad k_z = k_\circ + k_3 e^{i\omega t}$$

به آسانی در می‌یابیم که چنین جوابی فقط در بسامد

$$\omega_c = eB\left(\frac{\sin^2\theta}{m_L\,m_T} + \frac{\cos^2\theta}{m_T^2}\right)^{1/2} \qquad (۵-۵۸)$$

می‌تواند وجود داشته باشد. بنابراین بسامد سیکلوترونی به سمتگیری میدان بستگی دارد؛ این بسامد اغلب بر حسب **جرم مؤثر سیکلوترونی** چنین تعریف می‌شود

$$m_c = eB/\omega_c \qquad (۵-۵۹)$$

دردوحّدفرین $\theta = ۰^\circ$ و $\theta = ۹۰^\circ$، می‌بینیم‌که به ترتیب $m_c = m_T$ و $m_c = (m_L m_T)^{1/2}$ است. دو تشدید الکترونی در شکل (۵-۱۲) نمایشگر سهمهای ناشی از **بسته‌های** متفاوت الکترونهای نوار رسانش در شکل (۵-۱۳) است (مسئله ۵-۷ را ببینید). لذا با تحلیل آزمایشهای تشدید سیکلوترونی برای میدان با زوایای متفاوت می‌توان جزئیات رابطهٔ پاشندگی الکترون را استنتاج کرد.

۵-۶ چگالیهای حاملهای غیر متعادل

در اکثر قطعات نیمرسانا به هنگام عمل، تراکم حاملها نسبت به مقداری که در تعادل گرمایی دارند مختل می‌شود. برای درک رفتار چنین قطعاتی باید معادلاتی استخراج کنیم که تغییرات فضایی و زمانی این اختلالها را توصیف کنند. چگالیهای حاملها را به شکل زیر می‌نویسیم

$$n(x,t) = n_\circ + n'(x,t) \qquad (۵-۶۰)$$

$$p(x,t) = p_\circ + p'(x,t)$$

که در آن $p_\circ$ و $n_\circ$ تراکمهای در تعادل گرمایی هستند، که در نیمرسانای همگن با آلایش یکنواخت مستقل از مکان هستند- انحراف از این تراکمها، n' و p'، را تنها تابع یک مختصهٔ فضایی می‌گیریم، هر چند که تعمیم این وابستگی به بیش از یک مختصه آسان است. همچنین فرض خواهیم کرد که اختلالهای n' و p' در مقایسه با تراکم حامل ***اکثریت*** کوچک است؛

بنابراین در یک نیمرسانای نوع n داریم

$$n', p' \ll n_\circ \qquad (۶۱-۵)$$

۵-۶-۱ معادلات پیوستگی

فرایندهایی را در نظر می‌گیریم که می‌توانند تراکم حاملها در نیمرسانا در ناحیهٔ بین x و $x+\delta_x$ را تغییر دهند (شکل ۵-۱۴).

(۱) ***باز ترکیب***. یک الکترون در نوار رسانش می‌تواند به یک حالت خالی در نوار ظرفیت بیفتد و اتلاف یک زوج الکترون ـ حفره را به بار آورد. باز ترکیب علاوه بر این فرایند مستقیم، از طریق دامها و یا در سطح فرمی رخ می‌دهد. دامهای حالتهای جایگزیده با انرژیهای نزدیک به وسط گاف نوار هستند (اتمهای ناخالصی کلاً در سیلیسیم چشمه‌ای برای چنین ترازهاست) که الکترون پیش از آن که به نوار ظرفیت بیفتد به این دامها سقوط می‌کند. ساز و کار هرچه باشد، باز ترکیب باعث ناپدید شدن حفره‌ها و الکترونها با آهنگ یکسان می‌شود، این آهنگ را برای واحد حجم توسط r نشان می‌دهیم

(۲) ***تولید***. این فرایند مخالف باز ترکیب است؛ یک الکترون در نوار ظرفیت از یک چشمه، انرژی کافی برای ارتقاء به نوار رسانش در یافت می‌کند، در این فرایند یک زوج الکترون ـ حفره آفریده می‌شود. آهنگ تولید در واحد حجم را با g نشان می‌دهیم و توجه داریم که هردو نوع حامل با یک آهنگ تولید می‌شوند. فوتونهای مربوط به تابش در تعادل گرمایی درون بلور چشمهٔ داخلی انرژی تولیداند.

(۳) **پخش** . اگر تراکم حامل به مکان بستگی داشته باشد، پخش رخ می‌دهد. فرض می‌کنیم که چگالی جریان تعداد الکترونها و حفره‌ها، J_e و J_h توسط **قانون فیک** به صورت زیر بیان شوند.

$$J_e = -D_e \frac{\partial n}{\partial x} \quad \text{و} \quad J_h = -D_h \frac{\partial p}{\partial x}$$

شکل ۵-۱۴ : راههای که در آنها تراکم الکترونها در ناحیهٔ بین x و $x+\sigma_x$ می‌تواند تغییر کند.

که در آن D_e و D_h ثابتهای پخش متناظراند. آهنگ خالص ورود الکترونها به ناحیهٔ بین x و $x+\delta x$ در اثر پخش به ازای واحد سطح توسط اختلاف بین مقادیر J_e در x و $x+\delta x$ بیان می‌شود و بنابراین می‌توان آن را به صورت زیر نوشت

$$-\frac{\partial J_e}{\partial x}\ dx = D_e \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}\ dx$$

در مورد حفره‌ها نیز عبارت مشابهی به دست می‌آید.

(۴) **حرکت در *میدان الکتریکی*.** در حضور میدان الکتریکی (که در جهت x فرض شده است) چگالی جریان الکتریکی الکترونها و حفره‌ها به ترتیب $ne\mu_e E$ و $pe\mu_h E$ است (معادلهٔ (۵-۴۰)). چگالی جریان تعداد متناظر به قرار زیر است

$$J_e = -n\mu_e E \quad \text{و} \quad J_h = p\mu_h E$$

در اینجا نیز همانند جریانهای پخش، آهنگ خالص ورود الکترونها به ناحیهٔ بین xو $x+\sigma x$ به ازای واحد سطح توسط اختلاف بین مقادیر J_e در x و $x+\delta x$ تعیین می‌شود و توسط رابطهٔ زیر بیان می‌شود

$$-\frac{\partial J_e}{\partial x}\ dx = \mu_e \frac{\partial (nE)}{\partial x}\ dx$$

با افزودن سهمهایی که در بالا بر شمردیم نتیجه می‌گیریم که آهنگ خالص تغییر چگالی الکترون در ناحیهٔ بین x و $x+\delta x$ چنین است

$$-\frac{\partial n}{\partial t} = g - r + D_e \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \mu_e \frac{\partial (nE)}{\partial x} \qquad \text{(۵-۶۲الف)}$$

که در آن از تمام جملات یک فاکتور dx را حذف کرده‌ایم. معادلهٔ (۵-۶۲ الف) به **معادلهٔ پیوستگی** برای الکترونها معروف است. معادلهٔ پیوستگی برای حفره‌ها که به همین طریق تعیین می‌شود به قرار زیر است

$$\frac{\partial p}{\partial t} = g - r + D_h \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \mu_h \frac{\partial (pE)}{\partial x} \qquad \text{(۵-۶۲ب)}$$

۵-۶-۲ خنثایی الکتریکی

از معادلات (۵-۶۲) چنین به نظر می‌رسد که الکترونها و حفره‌ها به طور مستقل حرکت می‌کنند، ولی این ذهنیت گمراه کننده است زیرا میدان الکتریکی که در هر دو معادله ظاهر می‌شود سهمی از چگالیهای حامل مختل شده را در بردارد، که حرکت الکترونها و حفره‌ها را به طور بسیار قوی جفت می‌کند. اثر این جفتیدگی آن است که در یک نیمرسانای با آلایش همگن

هر انحراف آنی از خنثایی الکتریکی در یک مقیاس زمانی بسیار کوتاه ناپدید می‌شود. یا اگر یک انحراف از خنثایی الکتریکی در نقطهٔ بخصوصی از نیمرسانا باقی بماند، خنثایی الکتریکی در فاصلهٔ بسیار کوتاهی از این نقطه برقرار می‌شود. در هر دو مورد خنثایی الکتریکی توسط توزیع مجدد حامل بار اکثریت، ناشی از میدان الکتریکی مربوط به ناحیهٔ باردار حاصل می‌شود.

چگالی بار در نقطه‌ای از نیمرسانا، عبارت است از

$$\rho = e\left(p + N_D^{+} - n - N_A^{-}\right) \qquad (۵-۶۳)$$

با درج معادلات (۵-۶۰) و یادآوری اینکه در تعادل گرمایی نیمرسانا از نظر الکتریکی خنثی است (معادلهٔ (۵-۲۶)) را به دست می‌آوردیم

$$\rho = e\left(p' - n'\right) \qquad (۵-۶۴)$$

بنابراین می‌بینیم که وقتی اختلال چگالیهای الکترون و حفره مساوی باشند خنثایی الکتریکی حاصل می‌شود. میدان الکتریکی تولید شده توسط انحراف از خنثایی الکتریکی به وسیلهٔ قانون گاؤس، $div\, \mathbf{E} = \rho / \varepsilon \varepsilon_0$، بیان می‌شود، بنابراین برای تغییرات فقط برحسب x داریم

$$\frac{dE}{dx} = \frac{e\left(p' - n'\right)}{\varepsilon \varepsilon_0} \qquad (۵-۶۵)$$

می‌خواهیم تأثیر این میدان الکتریکی را برای توزیع حامل اکثریت، که آنها را الکترون در نظر می‌گیریم، محاسبه کنیم. معادلهٔ (۵-۶۵) را در معادلهٔ پیوستگی برای الکترونها (معادلهٔ (۵-۶۲ الف)) قرار می‌دهیم تا معادلهٔ زیر را به دست آوریم

$$\frac{\partial n'}{\partial t} = g - r + D_e \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} + \mu_e E \frac{\partial n'}{\partial x} + \mu_e n \frac{e\left(p' - n'\right)}{\varepsilon \varepsilon_0}$$

که در آن بااستفاده از این حقیقت که n_0 ثابت است مشتقهای n را با مشتقهای n' تعویض کرده‌ایم. با استفاده از معادلهٔ (۵-۶۵) می‌بینیم که (حداقل در غیاب میدان الکتریکی خارجی) E برحسب انحراف از تعادل، از مرتبهٔ اول است؛ بنابراین جملهٔ $\mu_e E \partial n' / \partial x$ از مرتبهٔ دوم است و از آن چشم‌پوشی می‌کنیم. خواهیم دید که باز ترکیب و تولید در مقایسه با جملات باقی مانده در این معادله، نمایشگر فرایندهای کندی هستند و از آنها نیز چشم‌پوشی می‌کنیم. معادلهٔ حاصل را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$\tau_D \frac{\partial n'}{\partial t} = \left(p' - n'\right) + \lambda_D^2 \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} \qquad (۵-۶۶)$$

که در آن $\tau_D = \varepsilon\varepsilon_\circ / n e\mu_e = \varepsilon\varepsilon_\circ / \sigma_e$ به نام **زمان واهلش دی الکتریک** معروف است و $\lambda_D = (\varepsilon\varepsilon_\circ D_e / n e\mu_e)^{1/2}$ **طول دبی** نامیده می‌شود.

به بررسی جزئیات معادلهٔ (۵-۶۶) نیاز نخواهیم داشت، بلکه فقط رفتار کلی آنها را مورد توجه قرار خواهیم داد (مسئلهٔ ۵-۸ راببینید) که یک مقدار متناهی $p' - n'$ در هر نقطه از فضا یا در هر لحظه از زمان توسط توزیع مجدد الکترونها با مقیاس زمانی τ_D و مقیاس طولی λ_D ناپدید می‌گردد. واضح است که مرتبهٔ بزرگی این کمیتها مهّم است. برای تخمین τ_D یک مقدار نوعی $100\ \Omega^{-1} m^{-1}$ را برای σ_e، سهم الکترونها در رسانندگی، اختیار می‌کنیم و به دست می‌آوریم

$$\tau_D = \frac{\varepsilon\varepsilon_\circ}{\sigma_e} \approx \frac{10 \times 10^{-11}}{100} = 10^{-12}\ s.$$

برای محاسبهٔ λ_D می‌توانیم رابطهٔ اینشتین را (که در بخش ۶-۲ اثبات شده است) را به کاربریم،

$$D_e = \frac{k_B\ T}{e}\ \mu_e \qquad (۶۷\text{-}۵)$$

و برای $T = 300\ K$، $\varepsilon = 10$ و $n = 10^{22}\ m^{-3}$ داریم

$$\lambda_D = \left(\frac{k_B\ T\ \varepsilon\varepsilon_\circ}{ne^2}\right) \approx 400\ \text{Å} \qquad (۶۸\text{-}۵)$$

این تخمین‌ها به ما می‌گویند که τ_D و λ_D به ترتیب بسیار کوتاهتر از مقیاسهای زمانی و طولی مربوط به اکثر پدیده‌های موجود در نیمرساناها هستند. در نتیجه، در محاسبهٔ چنین پدیده‌هایی می‌توانیم از انحراف خنثایی الکتریکی چشم پوشی کنیم.

بنابراین در نیمرساناهای همگن حرکت حامل اکثریت چنان است که در هر جایی $n' = p'$ می‌شود و فقط باید معادلهٔ پیوستگی را برای حاملهای ***اقلیت*** حل کنیم.

(۵-۶۹ الف)، در نیمرسانای نوع p

$$\frac{\partial n'}{\partial t} = g - r + D_e\ \frac{\partial^2 n'}{\partial x^2} + \mu_e\ E\ \frac{\partial n'}{\partial x}$$

(۵-۶۹ ب)، در نیمرسانای نوع n

$$\frac{\partial p'}{\partial t} = g - r + D_h\ \frac{\partial^2 p'}{\partial x^2} - \mu_h\ E\ \frac{\partial p'}{\partial x}$$

در اینجا E میدان الکتریکی خارجی است که از نظر فضایی ثابت است، معادلهٔ (۵-۶۵) و خنثایی الکتریکی تضمین می‌کنند که شیب E صفر شود.

۵-۶-۳ تولید و باز ترکیب

حال جملات باز ترکیب و تولید در معادلات (۵-۶۹) را در نظر می‌گیریم. در تعادل گرمایی آهنگهای باز ترکیب و تولید با هم برابرند و مقدار آنها را با $g_\circ(T)$ نمایش می‌دهیم تا وابستگی

دمایی آن را نشان دهیم. g آهنگ‌گذار الکترونهای نوار ظرفیت به نوار رسانش، به تعداد الکترونها در نوار ظرفیت و به احتمال اینکه در هر لحظه هر یک از الکترونها انرژی کافی برای انجام‌گذار به دست آورده باشد، بستگی دارد. هیچ یک از این دو عامل به طور قابل ملاحظه‌ای تحت‌تاثیر اختلالهای کوچک در تراکمهای حامل نیستند (به یاد داشته باشید که تراکم الکترونهای نوار ظرفیت بسیار بزرگتر از n' و p' است)، و در نتیجه وقتی تراکمهای حامل از مقادیر در حال تعادلشان به اندازهٔ مقادیر کوچکی مختل می‌شوند، آهنگ تولید گرمایی در همان مقدار $g_\circ(T)$ باقی می‌ماند. برعکس آهنگ باز ترکیب برای باز ترکیب مستقیم به تراکمهای حامل بستگی دارد. از آنجا که هر فرایند باز ترکیب شامل برهم کنش یک الکترون در نوار رسانش با یک حفره در نوار ظرفیت است می‌توان انتظار داشت که آهنگ باز ترکیب به طور خطی هم به تراکم الکترون و هم به تراکم حفره بستگی داشته باشد، به طوری که $r=\kappa(T)np$، که در آن $\kappa(T)$ به دما و نه به تراکم حامل بستگی دارد. بنابراین می‌توان نوشت

$$g-r=g_\circ(T)-k(T)np=g_\circ(T)-k(T)(n_\circ+n')(p_\circ+p')$$
$$=-k(T)(n_\circ p'+p_\circ n'+n'p')$$

که در آن برای به دست آوردن سطر آخر از $g_\circ(T)=k(T)n_\circ p_\circ$ استفاده کرده‌ایم، این درست شرط آن است که در تعادل گرمایی باید آهنگهای باز ترکیب و تولید با هم برابر باشند. یکی از سه جملهٔ باقی مانده از دو جملهٔ دیگر بسیار بزرگتر است؛ اگر به یاد آوریم که خنثایی الکتریکی ایجاب می‌کند که $n'=p'$ و اینکه n' و p' هر دو بسیار کوچکتر از تراکم حامل اکثریت‌اند، آنگاه در مادهٔ نوع n بزرگترین جمله $-k(T)n_\circ p'$ و در مادهٔ نوع p بزرگترین جمله $-k(T)p_\circ n'$ است. این جملات را می‌توان به ترتیب به صورت $-p'/\tau_n$ و $-n'/\tau_p$ نوشت، که در آن τ_n و τ_p را به ترتیب **طول عمرهای حامل اقلیت** در مادهٔ نوع n یا p می‌نامند. طول عمرهای حامل، τ_n و τ_p، را با زمانهای پراکندگی τ_h و τ_e اشتباه نکنید. به این ترتیب معادلات پیوستگی در مورد حاملهای اقلیت را می‌توان برای الکترونها در نیمرساناهای نوع p به شکل زیر

$$\frac{\partial n'}{\partial t}=-\frac{n'}{\tau_p}+D_e\frac{\partial^2 n'}{\partial x^2}+\mu_e E\frac{\partial n'}{\partial x} \qquad \text{(۵-۷۰ الف)}$$

و برای حفره‌ها در نیمرساناهای نوع n به شکل زیر نوشت

$$\frac{\partial p'}{\partial t}=-\frac{p'}{\tau_n}+D_h\frac{\partial^2 p'}{\partial x^2}-\mu_h E\frac{\partial p'}{\partial x} \qquad \text{(۵-۷۰ ب)}$$

ولی شکلی که تعیین کرده‌ایم اعتبار عامتری دارد. عبارتهای مربوط به طول عمر حاملها برای انواع دیگر باز ترکیب متفاوت است. طول عمر حامل اقلیت نوعاً s ${}^{-۷}$۱۰ است؛ این به مراتب طولانی‌تر از زمان واهلش دی الکتریکی τ_D است، بنابراین صرفنظر کردن از فرایندهای بازترکیب و تولید در بخش ۵-۶-۲ را توجیه می‌کند.

اکنون معادلات (۵-۷۰) را در دو وضعیت مهم به کار می‌بریم ، که تصویری فیزیکی از فرایندهایی که رخ می‌دهند را فراهم می‌سازد.

۵-۶-۴ تزریق حاملهای اقلیت با آهنگ مانا

میلهٔ درازی از نیمرسانای نوع p، با سطح مقطع Aرا مطابق شکل ۵-۱۵الف در نظر می‌گیریم و فرض می‌کنیم که از یک سر آن آهنگ مانای N در واحد سطح در ثانیه الکترون تزریق شود. در یک حالت مانا ($\partial n' / \partial t = ۰$) و در غیاب میدان الکتریکی خارجی، معادلهٔ (۵-۷۰الف) چنین می‌شود.

$$\frac{\partial^{۲} n'}{\partial x^{۲}} = \frac{n'}{L_e^{۲}} \qquad (۵\text{-}۷۱)$$

که در آن

$$L_e = (D_e \tau_e)^{۱/۲} \qquad (۵\text{-}۷۲)$$

طول پخش الکترونها نامیده می‌شود و نوعاً در حدود μm ۲۰ است؛ اهمیت این کمیت به زودی روشن می‌شود.

جواب معادلهٔ (۵-۷۱) عبارت است از

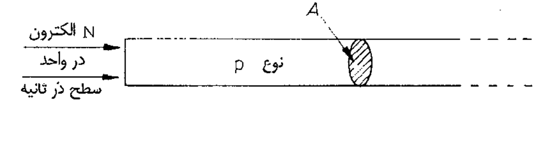
$$n' = C_۱ e^{-x/L_e} + C_۲ e^{+x/L_e} \qquad (۵\text{-}۷۳)$$

که در آن $C_۱$ و $C_۲$ ثابتهای انتگرال‌گیری‌اند. اگر میله ناحیهٔ $x \geq ۰$ را اشغال کند جملهٔ دوم پیش‌بینی می‌کند که تراکم الکترون در x های بزرگ به طور نمایی با xافزایش می‌یابد؛ این نتیجه در یک میلهٔ بلند غیر فیزیکی است و بنابراین در این مورد قرار می‌دهیم $C_۲ = ۰$. سپس $C_۱$ با استفاده از چگالی جریان تعداد در $x=۰$ تعیین می‌شود. بنابراین

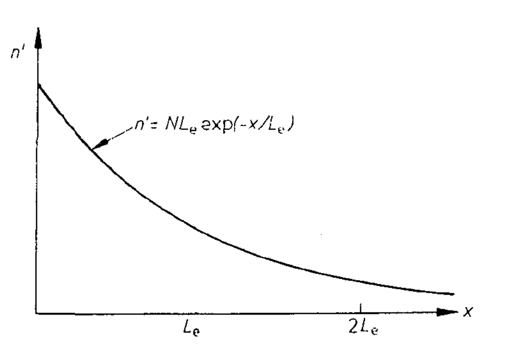
$$N = -D_e \left[\frac{\partial n'}{\partial x}\right]_{x=۰} = \frac{C_۱}{L_e}$$

و تراکم الکترون اضافی از رابطهٔ زیر به دست می‌آید

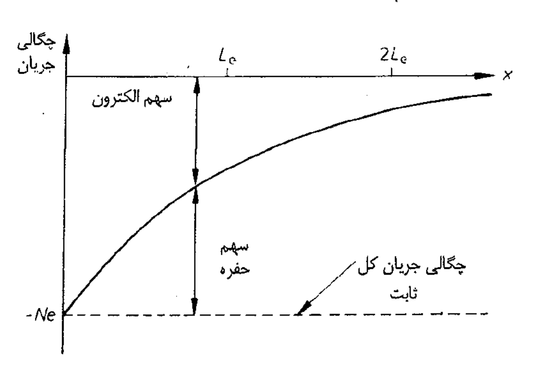
$$n' = N L_e e^{-x/L_e} \qquad (۵\text{-}۷۴)$$



(الف) تزریق الکترونها از یک سر به یک میلهٔ دراز از نیمرسانای نوع p



(ب) تراکم اضافی الکترونها برحسب مکان درون میله.



(ج) چگالی جریان الکتریکی کل ثابت است ولی سهم نسبی الکترونها و حفره‌ها نسبت به مکان تغییر می‌کند.

شکل ۵-۱۵

تراکم الکترون در شکل ۵-۱۵(ب) نشان داده شده است و می‌بینیم که با افزایش x، به طور نمایی، با طول میرایی L_e افت می‌کند. بنابراین طول پخش، فاصلهٔ میانگینی است که یک الکترون قبل از باز ترکیب پخش می‌شود. شکل ۵-۱۵(ج) نمایشگر جریان پخشی الکترونی متناظر است، $D_e\ \partial n'/\partial x$، که این جریان نیز به طور نمایی با طول پخش L_e کاهش می یابد. برای ابقای خنثایی الکتریکی، باید چگالی جریان الکتریکی کل ثابت بماند. حصول این امر همان‌گونه که در شکل ۵-۱۵ ج نشان داده شده است توسط یک جریان حفره که با x افزایش می‌یابد تحقق پیدا می‌کند. حفره‌ها به سوی $x=0$ شارش می‌کنند و جایگزین آنها می‌شوند که توسط بازترکیب با الکترونهای ورودی از بین رفته‌اند. البته می‌توانستیم جریان مانای حفره‌ها به درون یک نیمرسانای نوع n را برای نشان دادن همین اصول برگزینیم.

۵-۶-۵ تزریق یک تپ از حاملهای اقلیت

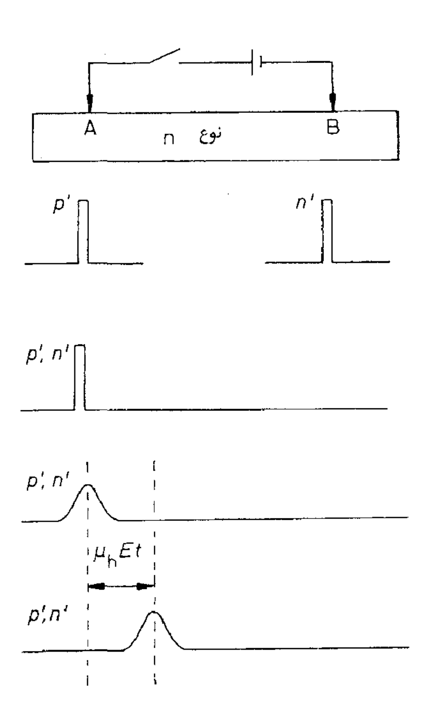
مدار سادهٔ شکل ۵-۱۶(الف) را، که اساس آزمایش هاینز-شاکلی (*Phys. Rev.* **75**, *691 (1949)*) را تشکیل می‌دهد در نظر می‌گیریم ، هدف این مدار تزریق تپی از حاملهای اقلیت (در این مورد حفره‌ها) در نقطه‌ای واقع بریک میلهٔ نازک دراز از نیمرساناست ؛ فرض کنید کلید برای مدت زمان کوتاهی بسته باشد. تأثیر این عمل تزریق تپی از حفره‌ها در نقطهٔ A واقع بر میله و تپی از الکترونها در نقطهٔ B است. بلافاصله پس از تپ، توزیعهای حامل اضافی همانند شکل ۵-۱۶(ب) هستند و لذا خنثایی الکتریکی نقض می‌شود؛ بنابراین حاملهای اکثریت تا زمانی که خنثایی عملاً پس از چند زمان واهلش[1] دی الکتریکی حاصل شود شارش می‌کنند. در نتیجه توزیعهای حامل اضافی همانند شکل ۵-۱۶ (ج) است؛ هیچ‌گونه حاملهای اضافی در نقطهٔ B باقی نمی‌مانند و تپهای مساوی حفره و الکترون در نقطهٔ A وجود دارند. متعاقباً فرایندهای پخش و بازترکیب خیلی کندتری رخ می‌دهند؛ این فرایندها باعث پهن‌شدگی تپ و کاهش مساحت زیر آن می‌شوند به گونه‌ای که در شکل ۵-۱۶ (د) نشان داده شده است (مساحت زیر تپ تعداد حفره‌های اضافی باقی مانده در نیمرسانا را تعیین می‌کند).

جواب معادلهٔ پیوستگی (معادلهٔ (۵-۷۰ ب)) که این رفتار را توصیف می‌کند با استفاده از نظریهٔ پخش (مسئلهٔ ۵-۹) کاملاً معلوم است و عبارت است از

$$p'(x,t)=\frac{P}{(4\varepsilon D_h\ t)^{1/2}}\ exp\left(-\frac{t}{\tau_n}-\frac{x^2}{4D_h t}\right)$$

که در آن P تعداد آغازی حفره‌ها (در سطح مقطع واحد) است که در $x=0$ و $t=0$ به نیمرسانا تزریق شده‌اند. لذا همچنان که حفره‌ها باز ترکیب می‌شوند مساحت زیرتپ به گونهٔ $exp\ (-t/\tau_n)$ کاهش می‌یابد، و همان طوری که برای یک فرایند پخش انتظار می‌رود پهنای این تپ در لحظهٔ t از مرتبهٔ $(D_h\ t)^{1/2}$ است. در آزمایش هاینز ـ شاکلی حفره‌ها نیز تحت‌تأثیر یک میدان الکتریکی dc قرار داشتند. این باعث حرکت مانای تپ در طول میله می‌شود. سرعت این تپ توسط تحرک حفره تعیین می‌شود؛ بنابراین، همان طوری که در شکل ۵-۱۶ (هـ) نشان داده شده است، پس از یک زمان t تمامی تپ به $x=\mu_h t E$ منتقل می‌شود. بنابراین مشاهدهٔ شکل و مکان تپ پس از یک زمان t روش مستقیمی برای اندازه‌گیری تحرک، ثابت پخش طول عمر حفره‌ها ارائه می‌کند. آزمایش هاینز-شاکلی اهمیت حامل اقلّیت در تعیین نیمرسانای غیر ذاتی را نشان می‌دهد.

۱- دریک آزمایش نوعی کلید حدود $1\mu s$ بسته است؛ چون این زمان خیلی بزرگتر از τ_D است، خنثایی الکتریکی در طول مدت فرایند تزریق ، با تقریب خوبی، باقی می‌ماند.



(الف) بستن کلید برای دورهٔ کوتاهی از زمان، تپی از حفره‌ها را در نقطه A و تپی از الکترونها را در نقطهٔ B تزریق می‌کند.
(ب) چگالی حاملهای اضافی بلافاصله پس از تزریق تپها.
(ج) تراکم حاملهای اضافی پس از چند زمان واهلش دی الکتریکی. خنثایی الکتریکی توسط شارش حاملهای اکثریت (الکترونها) حاصل شده‌است.
(د) در یک مقیاس زمانی قابل مقایسه با طول عمر حامل اقلیت، تپ حفره‌ها بر اثر پخش پهن شده است و سطح زیر آن در اثر بازترکیب کاهش می‌یابد.
(هـ) در حضور میدان الکتریکی مانای اضافی، تپ حفره‌ها نیز با سرعت $\mu_h E$ رانده می‌شود.

شکل ۵-۱۶

مسایل

۵-۱ انرژی الکترون در نزدیکی بالای نوار ظرفیت در یک نیمرسانا توسط رابطهٔ زیر بیان می‌شود

$$\varepsilon = -10^{-37} k^2 J$$

که در آن k بردار موج است. الکترونی از حالت

$$\mathbf{k} = 10^9\, \hat{\mathbf{k}}_x\ m^{-1}$$

کنده می‌شود، $\hat{\mathbf{k}}_x$ بردار یکّه در امتداد محور x است . (الف) جرم مؤثر ، (ب) انرژی، (ج) اندازه حرکت و (د) سرعت حفره را محاسبه کنید (علامت (یا جهت) هر جواب باید مشخص شود).

۵-۲ نمونه‌ای از سیلیسیم خالص می‌شود تا اینکه فقط 10^{18} بخشنده در متر مکعب را در برداشته باشد. رفتار ذاتی این نیمرسانا در زیر چه دمایی متوقف می‌شود؟

($E_G = ۱/۱eV$ و تراکم حامل ذاتی در $۳۰۰K$ برابر $۲\times۱۰^{۱۶}m^{-۳}$ است).

۵-۳ انتیمونیدایندیوم دارای ثابت دی الکتریکی $\varepsilon = ۱۷$ و جرم مؤثر الکترون $m_e = ۰/۰۱۴\,m$ است. مطلوبست محاسبهٔ (الف) انرژی یونش بخشنده (ب) شعاع مدار حالت پایه ، و (ج) تراکم بخشنده که در آن مدارهای اطراف ناخالصی‌های مجاور شروع به همپوشی می‌کنند. چه آثاری در حوالی این تراکم رخ می‌دهند، و چرا ؟

۵-۴ با استفاده از داده‌های شکل ۵-۹ مقدار انرژی یونش ناخالصی‌های ارسنیک را در ژرمانیوم برآورد کنید.

۵-۵ مقادیر ضرایب هال سدیم و انتیمونیدایندیوم ذاتی را در $۳۰۰K$ محاسبه کنید. سدیم دارای ساختار bcc با ضلع یاختهٔ یکّه $۴/۲۸\,\text{Å}$ است. انتیمونیدانیدیوم داری مقادیر $E_G = ۰/۱۵\,eV$، $m_e = ۰/۰۱۴m$ و $m_h = ۰/۱۸m$ است و الکترونها تنها حامل مؤثرند (چرا؟).

برای هر یک از نمونه‌های فوق با پهنای $۵mm$ و ضخامت $۱mm$، وقتی که یک جریان $۱۰mA$ از طول آنها می‌گذرد و میدان عمودی برابر $۰/۱T$ است، ولتاژ هال را برآورد کنید.

۵-۶ نمونه‌ای از ژرمانیوم توسط یک نوع از ناخالصی آلاییده شده است. اندازه‌گیریهایی را که برای تعیین علامت و تراکم حاملها، تحرّک و جرم مؤثر آنها انجام می‌دهید به طور مختصر شرح دهید.

اگر $۱۰^{۲۰}m^{-۳}$ بخشنده وجود داشته باشد، شرایط لازم برای مشاهدهٔ رضایتبخش تشدید سیکلوترونی چیست؟ (قطر برخورد بخشنده= $۳۰۰\,\text{Å}$ ، $m_e = ۱۰^{-۳۱}kg$)

۵-۷ مقادیر m_L و m_T در معادلهٔ (۵-۵۴) را با استفاده از داده‌های شکل ۵-۱۲ به دست آورید. (جهت میدان مغناطیسی در شرح زیر شکل مشخص شده است)

۵-۸ نشان دهید که با در نظر گرفتن دو حالت حدی مهّم :

(الف) نداشتن وابستگی زمانی؛

(ب) نداشتن وابستگی مکانی.

جوابهای معادلهٔ (۵-۶۶) دارای رفتار کیفی نشان داده شده دربخش ۵-۶-۲ هستند.

۵-۹ نشان دهید که معادلهٔ (۵-۵۷) جوابی از معادلهٔ پیوستگی برای حفره‌ها در نیمرسانای نوع n در غیاب میدان مغناطیسی است. تأیید کنید که تعداد کل حفره‌های باقیمانده در زمان t به گونهٔ $exp\,(-t/\tau_n)$ کاهش می‌یابند.

من تلویزیون را بسی آموزنده یافته‌ام. هر بار کسی آن را روشن می‌کند من به اتاق دیگر می‌روم و کتابی می‌خوانم.

گردچو مارکس



قطعات نیمرسانا

۶-۱ مقدمه

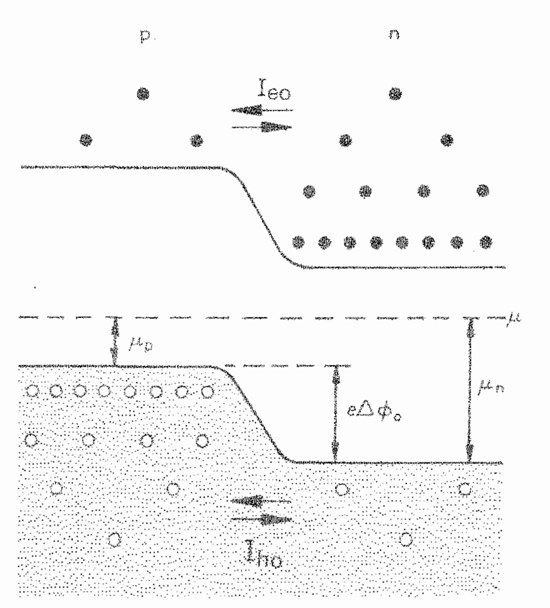
به کارگیری نیمرساناها در الکترونیک احتمالاً بزرگترین سهمی است که فیزیک حالت جامد در فن‌آوری قرن بیستم داشته است. برای درک اکثر قطعات نیمرسانا توجه به رفتار حاملهای بار در مجاورت سطح یا وجه مشترک ضروری است. مرز بین یک ناحیهٔ n و یک ناحیهٔ p، و مرز بین یک نیمرسانا و عایق، و مرز بین دو نیمرسانای مختلف از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. در این فصل به بررسی قطعاتی می‌پردازیم که این سه وضعیت در آنها به کار رفته باشد. تأکید ما بیشتر بر فهم فیزیک قطعات خواهد بود، تا کار بستهای فن‌آوری آنها.

۶-۲ پیوندگاه p-n با تغذیه صفر

مرز بین نواحی p و n را به راههای متعددی می‌توان ایجاد کرد. با ته- نشت لایهٔ نازکی از ناخالصی‌های بخشنده بر روی سطح یک نیمرسانای نوع p، و سپس قرار دادن نمونه، برای یک دورهٔ زمانی تنظیم شده، در دمای بالا جهت پخش بخشنده‌ها به درون زیر - لایه، یک ناحیهٔ n در مجاورت سطح ایجاد می‌شود که در آن تعداد بخشنده‌ها بیش از تعداد پذیرنده‌هایی است که از آغاز حضور داشته‌اند. پیوندگاه p-n را همچنین می‌توان توسط رشد بر آرستی (بخش ۶-۶) ماده‌ای حاوی ناخالصی‌های بخشنده بر روی زیر - لایه‌ای از نوع p تولید کرد. البته در هر دو روش فوق می‌توان ناحیه‌ای غنی از پذیرنده نیز در تماس با زیر - لایه‌ای از نوع n ایجاد کرد.

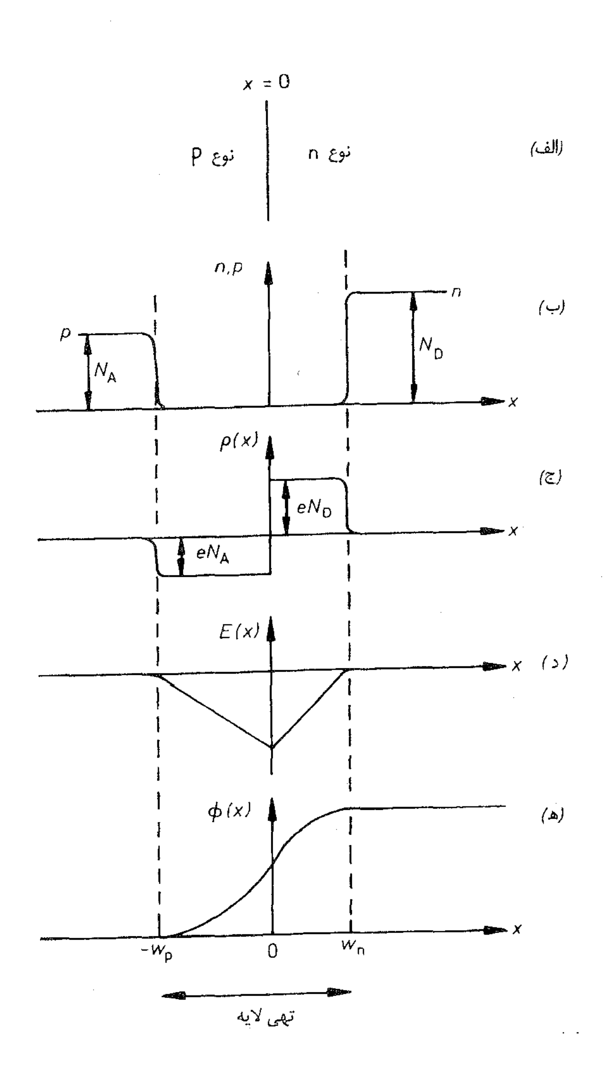
روشهای دیگری نیز برای تولید ناحیه‌ای از نیمرسانا که در آن تغییر از نوع p به نوع n در یک مقیاس طولی کوتاه صورت گیرد وجود دارد.

رفتار مفید پیوندگاه p-n همان گونه که در شکل ۶-۱ نشان داده شده است از وضعیت ترازهای انرژی الکترونها در ناحیهٔ پیوندگاه ناشی می‌شود. ترازهای انرژی تنها به صورت تابعی از مکان نمایش داده شده‌اند، و هیچ تمایزی بین مقادیر متفاوت **k** منظور نشده است؛ الکترونهای نوار رسانش با دایره‌های پر و حفره‌های نوار ظرفیت با دایره‌های خالی نشان داده شده‌اند. عامل تنظیم کنندهٔ وضعیت نسبی ترازها در دو طرف پیوندگاه، ضرورت یکنواختی پتانسیل شیمیایی است؛ این لازمهٔ تعادل گرمایی بین دو یا چند دستگاه در موردی است که در آن ذرات می‌توانند آزادانه بین دستگاهها حرکت کنند (فصل ۸ کتاب مندل[۲] را ببینید). در مورد پیوندگاه p-n تعادل با انتقال تعداد اندکی از الکترونها از ناحیهٔ n به ناحیهٔ p حاصل می‌شود، که در آنجا این الکترونها با حفره‌ها نابود می‌شوند، و ناحیه‌ای با حاملهای[۱] آزاد بسیار کم در مجاورت پیوندگاه به جا می‌گذارند، که در نتیجه به آن **تهی لایه** گفته می‌شود (شکل ۶-۲ (ب)). یونهای بخشندهٔ با بار مثبت در ناحیهٔ n از تهی‌لایه و یونهای پذیرندهٔ با بار منفی در ناحیهٔ p باعث می‌شوند که ناحیهٔ n دارای بار مثبت و ناحیهٔ p دارای بار منفی شوند (شکل ۶-۲ (ج)). این امر به گونه‌ای که در شکل ۶-۱ نشان داده شده است، موجب پایین‌تر آمدن ترازهای انرژی الکترون



شکل ۶-۱ : یک پیوندگاه p-n در حال تعادل که در آن الکترونها (با دایره‌های پر) و حفره‌ها (با دایره‌های خالی) نمایش داده شده‌اند. با وارسی این شکل، رابطهٔ $e\Delta\phi_0 = \mu_n - \mu_p$ (معادلهٔ (۶-۱)) به دست می‌آید. پیکانها جریانهای مساوی و مخالف الکترونها، I_{eo} و حفره‌ها، I_{ho} را که در بخش ۶-۳ مطرح می‌شوند مشخص می‌کنند.

۱- بنابراین توجه داشته باشید که تراکم الکترون و حفره هنوز هم باید قانون اثر جرم (معادلهٔ (۵-۲۲)) را در همه جا ارضاء کنند).



شکل ۶-۲: (الف) یک پیوندگاه p-n تیز که در آن نحوهٔ تغییر در (ب) تراکم حامل‌ها، n و p؛ (ج) چگالی خالص بار، ρ؛ (د) میدان الکتریکی، E؛ و (هـ) پتانسیل الکتروستاتیکی برحسب مکان نمایش داده شده است.

در طرف n و بالاتر رفتن آنها در طرف p می‌شود، که باعث می‌شود پتانسیل شیمیایی همان‌گونه که لازم است مستقل از مکان باشد؛ به خاطر داشته باشید که شکل ۶-۱ نمودار ترازهای انرژی ***الکترون*** است لذا ناحیهٔ با انرژی پایین ناحیه‌ای با پتانسیل الکتروستاتیکی بالاست.

کل اختلاف پتانسیل مورد نیاز $\Delta\phi_\circ$ برای ایجاد یک پتانسیل شیمیایی یکنواخت را می‌توان از معادلات (۵-۳۲) و (۵-۳۴) به دست آورد. بنابراین اگر از تراکم پذیرنده در طرف n پیوندگاه

صرفنظر کنیم و تراکم بخشنده را در این ناحیه با N_D نمایش دهیم، در آن صورت پتانسیل شیمیایی μ_n نسبت به لبهٔ نوار ظرفیت در طرف n و در فواصل زیاد از پیوندگاه طبق معادلهٔ (۵-۳۲) به قرار زیر است.

$$\mu_n = E_G - k_B \, T \ln \left(\frac{N_C}{N_D} \right)$$

به همین ترتیب برای ناحیهٔ P حاوی N_A پذیرنده به ازای واحد حجم و بدون بخشنده، پتانسیل شیمیایی μ_p نسبت به لبهٔ نوار ظرفیت در این ناحیه و در فواصل زیاد از پیوندگاه طبق معادلهٔ (۵-۳۴) به قرار زیر است.

$$\mu_p = k_B \, T \, \ln \left(\frac{N_V}{N_A} \right)$$

از این رو، برای مساوی شدن پتانسیل شیمیایی، از شکل ۶-۱ در می‌یابیم که لبه‌های نوار ظرفیت در دو طرف پیوندگاه باید به مقدار زیر تفاوت داشته باشند.

$$e \Delta \phi_\circ = \mu_n - \mu_p = E_G + k_B \, T \, \ln \left(\frac{N_D \, N_A}{N_C \, N_V} \right) \qquad (۶\text{-}۱)$$

که با به کارگیری معادلهٔ (۵-۲۳) به صورت زیر در می‌آید

$$\Delta \phi_\circ = \frac{k_B \, T}{e} \, \ln \left(\frac{N_D \, N_A}{n_i^۲} \right) \qquad (۶\text{-}۲)$$

که در آن n_i تراکم الکترون (یا حفره)در یک نمونه نیمرسانای ذاتی در همان دماست. این نکتهٔ مهم را باید به خاطر داشت که $\Delta\phi_\circ$ ماهیت یک پتانسیل تماسی را دارد؛ در هر مدار کامل اختلاف پتانسیلهای جبرانی در پیوندگاه‌های دیگر وجود دارند به گونه‌ای که در تعادل گرمایی هیچ جریانی شارش نمی‌کند. با جایگذاری $N_A = N_D = ۱۰^{۲۲} m^{-۳}$ در معادلهٔ (۶-۲) (n_i در جدول ۵-۱ داده شده است)، مقادیر نوعی $۰/۳ \, V$ و $۰/۷ \, V$ برای $\Delta\phi_\circ$ به ترتیب در Si و Ge در دمای $T = ۳۰۰ \, K$ حاصل می‌شود؛ $\Delta\phi_\circ$ تنها به طور ضعیفی به تراکم ناخالصی بستگی دارد کما اینکه خوانندگان می‌توانند با جایگذاری مقادیر مختلف برای N_A و N_D در معادلهٔ (۶-۲) این موضوع را برای خود بررسی کنند.

پهنای تهی‌لایه و تغییر در پتانسیل الکتروستاتیکی $\phi(x)$ در این لایه را می‌توان با دو فرض ساده کنندهٔ زیر با تقریب خوبی محاسبه کرد:

(۱) مرز بین نواحی n و p همان گونه که در شکل ۶-۲ (الف) نمایش داده شده است تیز است [1]، این مرز در $x = \circ$ در نظر گرفته شده است.
(۲) تراکم حاملهای اکثریت، در لبه‌های تهی لایه به سرعت از مقادیر حجمی خود در لبه‌های تهی‌لایه، کاهش می‌یابند، لبه در طرف p را در $x = -w_p$ و لبه در طرف n را در $x = w_n$ می‌گیریم؛ این کاهش خیلی سریع که در شکل ۶-۲ (ب) نمایش داده شده است، برای آن که لبه‌های تهی لایه خوش تعریف باشند ضروری است.

اگر این فرضها اعمال شوند، چگالی بار در مجاورت پیوندگاه همان‌گونه که در شکل ۶-۲ (ج) نمایش داده شده است با تقریب خوبی برابر می‌شود با:

$$\rho(x) = \begin{cases} -N_A\, e & -w_p < x < \circ \\ +N_D\, e & \circ < x < w_n \\ \circ & \text{هر جای دیگر} \end{cases} \tag{۶-۳}$$

پتانسیل الکتروستاتیکی توسط معادلهٔ پواسون به چگالی بار مربوط می‌شود.

$$\frac{d^{2}\phi}{dx^{2}} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon\varepsilon_\circ} \tag{۶-۴}$$

با یک بار انتگرال‌گیری از این معادله، میدان الکتریکی در تهی لایه به صورت زیر به دست می‌آید:

$$E = -\frac{d\phi}{dx} = \begin{cases} -\dfrac{N_A\, e}{\varepsilon\varepsilon_\circ}\,(x + w_p) & -w_p < x < \circ \\ \dfrac{N_D\, e}{\varepsilon\varepsilon_\circ}\,(x - w_m) & \circ < x < w_n \end{cases} \tag{۶-۵}$$

تغییر خطی E با x توسط انتگرال‌گیری از معادلهٔ (۶-۴) با چگالی ثابت بار در معادلهٔ (۶-۳) به دست می‌آید. میدان الکتریکی باید در نواحی درون حجم نیمرسانا خارج از تهی‌لایه صفر شود و ثابتهای انتگرال‌گیری در معادلهٔ (۶-۵) به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که پیوسته بودن E در مرزهای تهی‌لایه تضمین شود. با استفاده از معادلهٔ (۶-۵) و ضرورت پیوستگی E در $x=\circ$ رابطهٔ زیر حاصل می‌شود.

$$N_A\, e\, w_p = N_D\, e\, w_n \tag{۶-۶}$$

۱- یک چنین پیوندگاهی را **ناگهانی** توصیف می‌کنند. مسئلهٔ ۶-۳، $\phi(x)$ را برای یک پیوندگاه با مرز غیر تیز بین نواحی n و p محاسبه می‌کند.

این معادله همان عبارت خنثایی الکتریکی کل مبنی بر آن است، که تعداد پذیرنده‌های یونیده در طرف pی تهی لایه مساوی تعداد بخشنده‌های یونیده در طرف n است. میدان الکتریکی معادلهٔ (۶-۵) در شکل ۶-۲ (د) نشان داده شده است.

با انتگرال‌گیری از میدان الکتریکی (معادلهٔ (۶-۵))، برای پتانسیل به دست می‌آوریم:

$$\phi(x) = \begin{cases} \frac{eN_A}{2\varepsilon\varepsilon_0}\,(x+w_p)^2 & -w_p < x < 0 \\ \Delta\phi_0 - \frac{eN_D}{2\varepsilon\varepsilon_0}(x-w_n)^2 & 0 < x < w_n \end{cases} \tag{۶-۷}$$

تغییر خطی E با x در معادلهٔ (۶-۵) به وابستگی مربعی ϕ به x در معادلهٔ (۶-۷) منجر می‌شود. ثابتهای انتگرال‌گیری به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که پتانسیل در ناحیهٔ p در خارج تهی‌لایه صفر شود (این، صفر پتانسیل را تعریف می‌کند) و اختلاف پتانسیل کل در عرض پیوندگاه برابر $\Delta\phi_0$ باشد که با معادلات (۶-۱) و (۶-۲) داده می‌شود. پتانسیل $\phi(x)$ باید در $x=0$ پیوسته باشد و این، رابطه زیر را می‌دهد :

$$\Delta\phi_0 = \frac{e}{2\varepsilon\varepsilon_0}\,(N_A w_p^2 + N_D w_n^2) \tag{۶-۸}$$

پتانسیل به صورت تابعی از مکان در شکل ۶-۲ (هـ) نشان داده شده است.

سرانجام، حل همزمان معادلات (۶-۶) و (۶-۸) پهنای تهی لایه در دو طرف پیوندگاه را به صورت زیر می‌دهد :

$$w_n = \left(\frac{2\varepsilon\varepsilon_0\, N_A\, \Delta\phi_0}{eN_D\,(N_A+N_D)}\right)^{\frac{1}{2}} \quad , \quad w_p = \left(\frac{2\varepsilon\varepsilon_0\, N_D\, \Delta\phi_0}{eN_A\,(N_A+N_D)}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{۶-۹}$$

چنین بر می‌آید که تهی‌لایه در پیوندگاه‌های با آلایش کمتر (N_A و N_D کوچکتر) پهن‌تر است؛ پهنای $w_n + w_p$ به ازای $N_A \sim N_D \sim 10^{21}\,m^{-3}$ حدود $1\,\mu m$ و به ازای $N_A \sim N_D \sim 10^{23}\,m^{-3}$ حدود $0/1\,\mu m$ است. برای آن که فرض ما مبنی بر تیزی پیوند معتبر باشد لازم است که تغییر در آلایش از نوع p به نوع n در مقیاس طولی به مراتب سریع‌تر از این فاصله رخ دهد.

آن چه برای ما باقی می‌ماند آن است که این فرض را که تراکم حامل اکثریت در لبه‌های تهی‌لایه خیلی سریع کاهش می‌یابد بررسی کنیم چون تغییر $\phi(x)$ در مقیاس طولی اتمی کُند است محاسبات ما برای تراکم حاملها که در بخش ۵-۳-۲ ارائه شد، معتبر باقی می‌ماند، مقادیر

n و p در هر نقطه، با استفاده از معادلات (۵-۱۶) و (۵-۲۰) توسط مکان پتانسیل شیمیایی نسبت به لبهٔ نوارهای رسانش و ظرفیت تعیین می‌شود. پتانسیل شیمیایی ثابت است و تغییر فضایی لبه‌های نوار با $e\phi(x)$ داده می‌شود. بنابراین به سادگی می‌توانیم چگالی حاملها را به صورت زیر بنویسیم:

$$n(x) = n_\circ \; exp\; [e\phi(x)/k_B\, T]$$

(۶-۱۰)

$$p(x) = p_\circ \; exp\; [-e\phi(x)/k_B\, T]$$

که در آن $n_\circ$ و $p_\circ$ تراکم الکترونها و حفره‌ها در نقاطی هستند که $\phi(x)$ در آنها صفر است؛ در وضعیت فعلی اینها تمام نقاطی هستند که در طرف p پیوندگاه و در خارج تهی‌لایه قرار دارند. کاهش سریع تراکم حاملهای اکثریت در لبه‌های تهی لایه از آن رو رخ می‌دهد که $k_B\, T$ در مقایسه با کل اختلاف انرژی $e\Delta\phi_\circ$ در عرض پیوندگاه، کوچک است؛ بنابراین یک تغییر کوچک در $\phi(x)$، تغییر بزرگی در تراکم حاملها ایجاد می‌کند (مسئله، ۶-۱ را ببینید).

معادلات (۶-۱۰) در وضعیتهای دیگری که پتانسیل الکتروستاتیکی به مکان وابسته باشد نیز معتبرند و می‌توانند برای به دست آوردن روابط بسیار مفید اینشتین بین ثابت پخش و تحرک حاملها به کار روند. در تعادل گرمایی، چگالی جریان الکترونها باید همه جا صفر باشد، و در ناحیه‌ای از نیمرسانا که در آن یک میدان الکتریکی وجود دارد، نظیر پیوندگاه p-n ، این به آن معناست که سهمهای مربوط به پخش و میدان الکتریکی باید یکدیگر را حذف کنند. بنابراین

$$e\, D_e\, \frac{\partial n}{\partial x} + n\, e\, \mu_e\, E = \circ \qquad (۶\text{-}۱۱)$$

از سوی دیگر با مشتق‌گیری از معادلهٔ (۶-۱۰) داریم

$$\frac{\partial n}{\partial x} = \frac{e}{k_B\, T}\, \frac{\partial \phi}{\partial x}\, n\,(x) \qquad (۶\text{-}۱۲)$$

با عنایت به اینکه $E = -\frac{\partial \phi}{\partial x}$، می‌بینیم که معادلات (۶-۱۱) و (۶-۱۲) تنها در صورتی سازگارند که

$$\frac{De}{\mu_e} = \frac{k_B\, T}{e} \qquad (۶\text{-}۱۳)$$

این رابطهٔ اینشتین برای الکترونهاست، که ما قبلاً از آن در بخش ۵-۶-۲ استفاده کرده‌ایم. به طور مشابه با توجه به اینکه جریان حفره نیز باید در تعادل گرمایی صفر شود می‌توانیم رابطهٔ اینشتین برای حفره‌ها را به دست آوریم

$$\frac{D_h}{\mu_h} = \frac{k_B T}{e} \qquad (۱۴-۶)$$

این روابط اینشتین تا زمانی که تراکم الکترون و حفره توسط توزیع بولتزمن در معادلات (۶-۱۰) داده شوند معتبرند.

۶-۳ پیوندگاه p - n با اعمال تغذیه

اعمال یک اختلاف پتانسیل اضافی V در عرض پیوندگاه p-n باعث شارش یک جریان الکتریکی از درون آن می‌شود. اگر طرف مثبت پتانسیل به ناحیهٔ p وصل شود، گفته می‌شود که پیوندگاه در **تغذیهٔ مستقیم** است و V مثبت گرفته می‌شود؛ اگر طرف مثبت به ناحیهٔ n وصل شود در آن صورت پیوند در **تغذیهٔ معکوس** و V منفی است. تهی لایه، به دلیل چگالی کم حامل در آن، در مقایسه با نواحی خنثای نیمرسانا در دو طرف مقاومت زیادی دارد و در نتیجه ولتاژ اعمالی در دو سر این لایه ظاهر می‌شود. از این رو، با به کار بردن قراردادی که برای علامت پذیرفته‌ایم، کل اختلاف پتانسیل در عرض تهی لایه برابر خواهد شد با

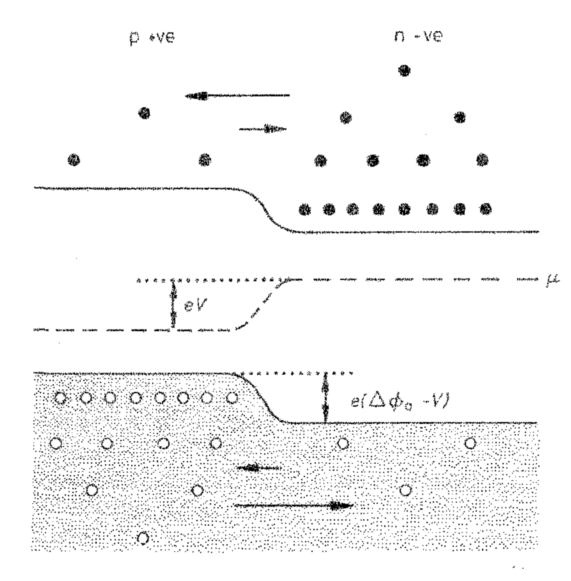
$$\Delta\phi = \phi_n - \phi_p = \Delta\phi_{\circ} - V \qquad (۱۵-۶)$$

که در آن $\Delta\phi_{\circ}$ افت پتانسیل در غیاب پتانسیل اعمالی است که توسط معادلات (۶-۱) و (۶-۲) داده می‌شود. بنابراین تغذیهٔ مستقیم، اختلاف پتانسیل کل را کاهش می‌دهد، حال آنکه تغذیهٔ معکوس آن را افزایش می‌دهد (شکل ۶-۳ را ببینید). برای سازگاری با علامت قراردادی برای V، باید جریان از p به n را مثبت بگیریم.

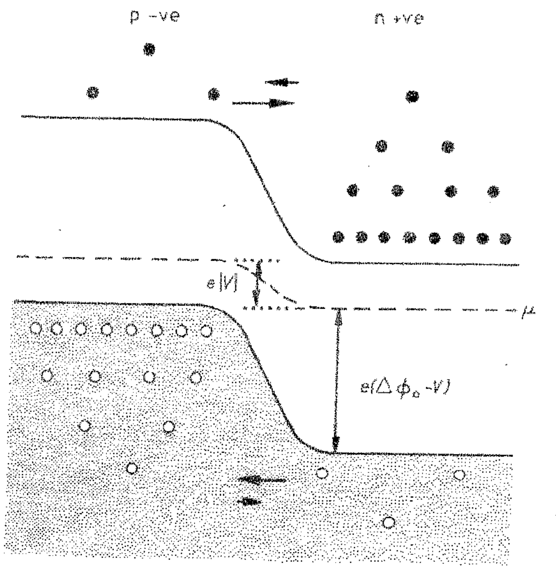
تغییر پتانسیل در تهی لایه همانند بخش قبل با حل معادلهٔ پواسون (معادلهٔ (۶-۴)) به دست می‌آید. بنابراین پهنای تهی لایه با تعویض $\Delta\phi_{\circ}$ در معادلات (۶-۹) با $\Delta\phi$ به قرار زیر به دست می‌آید.

$$w_n = \left(\frac{۲\varepsilon\varepsilon_{\circ} N_A (\Delta\phi_{\circ} - V)}{e N_D (N_A + N_D)}\right)^{\frac{۱}{۲}} , \quad w_p = \left(\frac{۲\varepsilon\varepsilon_{\circ} N_D (\Delta\phi_{\circ} - V)}{e N_A (N_A + N_D)}\right)^{\frac{۱}{۲}} \qquad (۱۶-۶)$$

می‌بینیم که پهنای تهی لایه با تغذیهٔ مستقیم کاهش و با تغذیهٔ معکوس افزایش می‌یابد. از آن جا که بار اتمهای ناخالصی یونیده درون تهی‌لایه با حاملهای بار جبران نمی‌شود، لذا در پیوندگاه p-n در هر واحد سطح، چگالیهای بار مساوی و با علامت مخالف به مقدار $\sigma = e N_D w_n = e N_A w_p$ وجود دارد (شکل ۶-۲ (ج) را ببینید). بنابراین پیوندگاه به گونه‌ای رفتار می‌کند که گویی دارای ظرفیت زیر به ازای واحد سطح است.



(الف) پیوندگاه p-n با تغذیهٔ مستقیم. ترازهای انرژی الکترون در ناحیهٔ p پایین‌تر از مقادیر نظیر در ناحیهٔ n هستند. از آن جا که سد انرژی کاهش می‌یابد، شارش الکترونها از n به p افزایش می‌یابد که این توسط پیکانهای بلندتر مشخص شده است. شارش حفره‌ها از p به n نیز به طور مشابه افزایش می‌یابد به گونه‌ای که هر دو نوع حامل در جریان الکتریکی خالص از p به n سهم دارند.



(ب) پیوندگاه p-n با تغذیهٔ معکوس. توجه کنید که V در این مورد منفی است. همان گونه که با پیکانها مشخص شده است، شارش حفره‌ها از p به n هر دو در اثر افزایش سد پتانسیل کاهش می‌یابند. جریان الکتریکی خالص کوچکی از n به p وجود دارد.

شکل ۶-۳

$$C = \frac{\sigma}{V} = \frac{e N_D w_n}{V} = \frac{1}{V} \left(\frac{2\varepsilon\varepsilon_0 \; e N_A N_D (\Delta\phi_0 - V)}{(N_A + N_D)} \right)^{\frac{1}{2}} \qquad (۱۷\text{-}۶)$$

که در آن مقدار w_n را از معادلهٔ (۶-۱۶) به کار برده‌ایم. گرچه این ظرفیت می‌تواند در مدارهای الکترونیکی که سرعت در آنها مهم است مسئله‌ای باشد، ولی در مدارهایی که در آنها ظرفیت متغیر با ولتاژ مورد نیاز است کاربرد خوبی دارد (مسئلهٔ ۶-۲ را ببینید)؛ پیوندگاههای p-n خاص این کاربرد به نام **دیودهای وراکتور** یا **واریکاپها** نامیده می‌شوند. این دیودها را تنها می‌توان تحت شرایط تغذیهٔ معکوس که در آن عبور جریان خیلی اندک است به کار برد.

در ادامه جریان الکتریکی حاصل از تغذیهٔ اعمالی در پیوندگاه p-n را محاسبه می‌کنیم. در غیاب تغذیه، انتقال ترازهای انرژی متناظر با اختلاف پتانسیل $\Delta\phi_0$ را می‌توان به عنوان سد پتانسیلی که شارش الکترونهای نوار رسانش از n به p را محدود می‌کند تلقی کرد: از شکل ۶-۱ می‌بینیم که تنها شمار معدودی از الکترونهای با انرژی کافی برای غلبه بر سد می‌توانند این گذار را انجام دهند و فرض می‌کنیم که این الکترونها به جریان **الکترونی** I_{eo} از n به P منجر شوند. در غیاب تغذیه، جریان کل الکترونی باید صفر باشد و لذا برای حصول این امر باید جریان الکترونی مساوی و مختلف الجهتی از p به n موجود باشد؛ این جریان معکوس از آن جا ناشی می‌شود که، گرچه تعداد بسیار کمی الکترون در ناحیهٔ p موجود است، ولی هر یک از این الکترونها که به لبهٔ تهی پخش شود، در اثر میدان الکتریکی موافق موجود در این لایه عرض پیوندگاه را خواهد پیمود. این جریانهای مساوی و مختلف الجهت با پیکانهایی در شکل ۶-۱ نشان داده شده‌اند.

باید I_{eo} را محاسبه کنیم و محاسبهٔ جریان از p به n سرراست‌تر است. اگر طول عمر n_p الکترون در واحد حجم در طرف p پیوندگاه برابر τ_p باشد، در آن صورت هر دو آهنگ ترکیب و تولید الکترونها در این طرف پیوندگاه مساوی $\frac{n_p}{\tau_p}$ به ازای واحد حجم است (بخش ۵-۶-۳). هر الکترون تازه تولید شده به طور متوسط قبل از باز ترکیب فاصلهٔ یک طول پخش L_e را طی می‌کند (بخش ۵-۶-۴ را ببینید). لذا با ذکر این که فقط الکترونهای تولید شده در فاصلهٔ یک طول پخش از لبهٔ تهی‌لایه، احتمال پخش به این لبه و عبور به ناحیهٔ n را دارند می‌توانیم I_{eo} را برآورد کنیم. بنابراین

$$I_{eo} \approx e \times \left(\frac{\text{آهنگ تولید}}{\text{حجم}}\right) \times (\text{حجم ناحیه‌ای به ضخامت } L_e \text{ مجاور تهی لایه})$$

$$= e \left(\frac{n_p}{\tau_p}\right) \; (L_e \; A)$$

که در آن A مساحت پیوندگاه است. با این فرض که تمامی پذیرنده‌ها در طرف p یونیده‌اند، به گونه‌ای که $n_p = \frac{n_i^2}{p_p} = \frac{n_i^2}{N_A}$ (از معادلهٔ (۵-۲۵))، می‌توانیم I_{eo} را به صورت زیر بنویسیم

$$I_{eo} = \frac{e\, D_e\; n_i^2}{L_e\; N_A} A \qquad (۶-۱۸)$$

که در آن از عبارت $L_e = (D_e \tau_p)^{\frac{1}{2}}$ (معادلهٔ ۵-۷۲)) نیز استفاده کرده‌ایم.

اثر تغذیهٔ مستقیم V آن است که سد پتانسیل را به مقدار eV آن گونه که در شکل ۶-۳ (الف) نشان داده شده است کاهش دهد. از آن جا که اشغال حالتهای الکترونی در نوار رسانش با توزیع بولتزمن (معادلهٔ (۵-۱۵)) داده می‌شود، این به افزایش تعداد الکترونهای طرف n که انرژی کافی برای غلبه برسد دارند با ضریبی برابر $exp\,(eV/k_B\,T)$ منجر می‌شود. بنابراین جریان الکترونی از n به p افزایش می‌یابد و به مقدار $I_{eo}\; exp\,(eV/k_B\,T)$ می‌رسد، ولی شارش از p به n تغییری نمی‌کند، زیرا سدپتانسیلی برای حرکت در این جهت وجود ندارد. عدم توازن در جریانهای الکترونی در شکل ۶-۳ (الف) مشخص شده است و جریان خالص ***الکترونی*** از پیوندگاه برابر است با

$$I_e = I_{eo}\;(e^{eV/k_B\,T} - 1) \qquad (۶-۱۹)$$

معادلهٔ (۶-۱۹) برای تغذیهٔ معکوس نیز معتبر است؛ در این مورد به علت افزایش سدپتانسیل به مقدار $e\,|\,V\,|$ مطابق شکل ۶-۳ (ب)، شارش الکترونها از n به p با ضریبی برابر $exp\;(eV/k_B\;T)$ کاهش می‌یابد[1].

ارائه جزئیات استدلال متناظر برای سهم حفره در جریان را به عنوان تمرین بر عهده خواننده می‌گذاریم. در این مورد $e\,\Delta\phi$ به عنوان سدپتانسیلی عمل می‌کند که مانع شارش حفره‌ها از p به n می‌شود؛ ارتفاع سد بازهم با تغذیهٔ مستقیم کاهش و با تغذیهٔ معکوس افزایش می‌یابد که به جریان خالص حفرهٔ زیر منجر می‌شود

$$I_h = I_{ho}\;(e^{eV/k_B\,T} - 1) \qquad (۶-۲۰)$$

که در آن، در مقایسه با معادلهٔ (۶-۱۸)، کمیت

$$I_{ho} \approx \frac{eD_h\;n_i^2}{L_h\;N_D} A \qquad (۶-۲۱)$$

مقدار جریانهای مساوی و مختلف‌الجهت حفره از پیوندگاه در غیاب اختلاف پتانسیل اعمالی است.

۱- این ضریب کمتر از واحد است چون V در تغذیهٔ معکوس منفی است.

جریان کل با افزودن سهمهای الکترون و حفره به صورت زیر به دست می‌آید

$$I = I_e + I_h = I_\circ \left(e^{eV/k_B T} - ۱\right) \tag{۶-۲۲}$$

که در آن

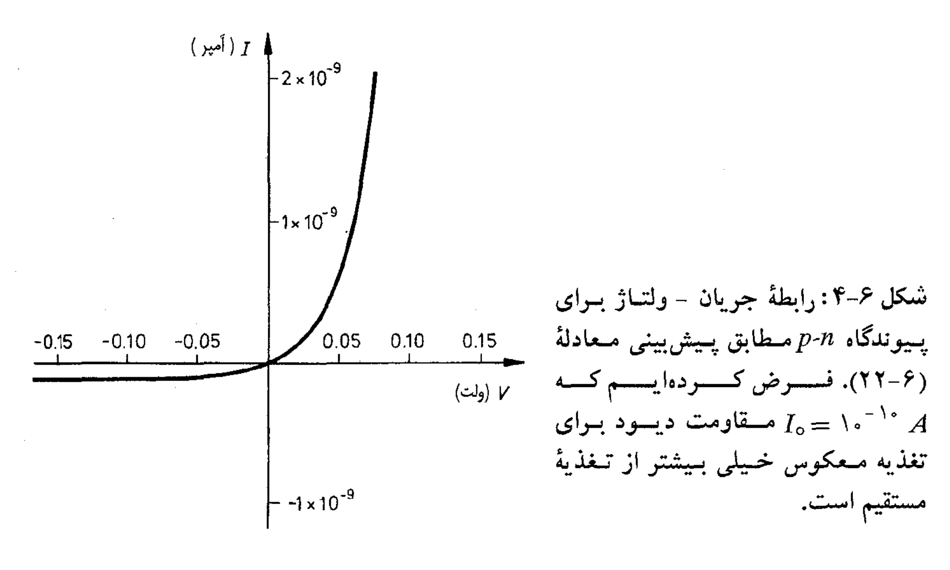
$$I_o = I_{eo} + I_{ho} = e n_i^۲ \, A \left(\frac{D_e}{L_e N_A} + \frac{D_h}{L_h N_D} \right) \tag{۶-۲۳}$$

چون ثابتهای پخش و طولهای پخش به طور ضعیفی به دما بستگی دارند، لذا وابستگی دمایی $I_\circ$ تحت‌الشعاع ضریب $exp(-E_G/\kappa_B \ T)$ موجود در $n_i^۲$ (معادلهٔ (۵-۲۳) است. رابطهٔ جریان ولتاژ در معادلهٔ (۶-۲۲) در شکل ۶-۴ رسم شده است. به دلیل عمل یکسوکنندگی بارز در این منحنی مشخصه، **دیود پیوندگاه** p-n به طور عمده جای دیود خلاء را برای یکسوکنندگی در مدارهای الکترونیکی گرفته است. معادلهٔ ۶-۲۱ بهترین مشخصهٔ یکسوکنندگی را که می‌توان با حاملهای بار e به دست آورد ارائه می‌کند. در فصل ۴۶ از جلد یک کتاب فاینمن[6] بحث جالبی ارائه شده است که نشان می‌دهد که مانستهٔ مکانیکی چنین یکسوکننده‌ای (یک راچت) نمی‌تواند قانون دوم ترمودینامیک را نقض کند.

روابط جریان - ولتاژ پیوندگاههای p-n واقعی به علامتهای مختلف با معادلهٔ (۶-۲۲) تفاوت دارند و ماسه عامل را در این جا بررسی می‌کنیم. افزایش سریع جریان با افزایش تغذیهٔ مستقیم، که در شکل ۶-۴ نمایان است به کاهش مقاومت مؤثر تهی لایه مربوط می‌شود؛ وقتی این مقاومت با مقاومت نواحی نمیرسانا در هر یک از دو طرف لایه قابل مقایسه شود، دیگر نمی‌توان از افت پتانسیل در عرض این نواحی صرفنظر کرد و این باعث می‌شود که افزایش جریان با ولتاژ با سرعت کمتری از مقدار پیش‌بینی شده توسط معادلهٔ (۶-۲۲) صورت گیرد. دومین تصحیح در معادلهٔ (۶-۲۲) از آن جا ناشی می‌شود که در محاسباتی که منجر به این معادله شد از باز ترکیب و تولید حامل‌ها درون تهی لایه صرفنظر شد؛ منظور کردن اینها منجر به سهم اضافه‌ای در جریان برای **تغذیه مستقیم** به صورت زیر می‌شود

$$I = I_\circ' \; e^{\frac{eV}{۲k_B T}} \tag{۶-۲۴}$$

(صفحهٔ ۳۲۱ از کتاب وان درزیل[19] را ببینید). معادلهٔ (۶-۲۴) فقط برای تغذیهٔ به قدر کافی بزرگ که در آن $I \gg I_\circ'$ باشد معتبر است؛ تفاوت عمده با معادلهٔ (۶-۲۲) در ضریب ۲ در نماست، و به آن معناست که سهم معادلهٔ (۶-۲۴) در ولتاژهای کمتر غالب است. همچنین، چون داریم



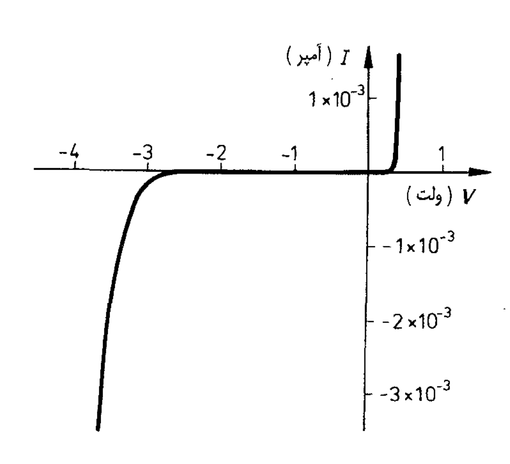
شکل ۶-۴: رابطهٔ جریان - ولتاژ برای پیوندگاه p-n مطابق پیش‌بینی معادلهٔ (۶-۲۲). فرض کرده‌ایم که $I_\circ = 10^{-10}$ A مقاومت دیود برای تغذیه معکوس خیلی بیشتر از تغذیهٔ مستقیم است.

$I'_\circ \propto n_i$ حال آن که $I_\circ \propto n_i^2$، جریان معادلهٔ (۶-۲۴) در دیودهای سیلیسیم مهم‌تر از دیودهای ژرمانیوم است، زیرا n_i در اولی به مراتب کوچک‌تر است.

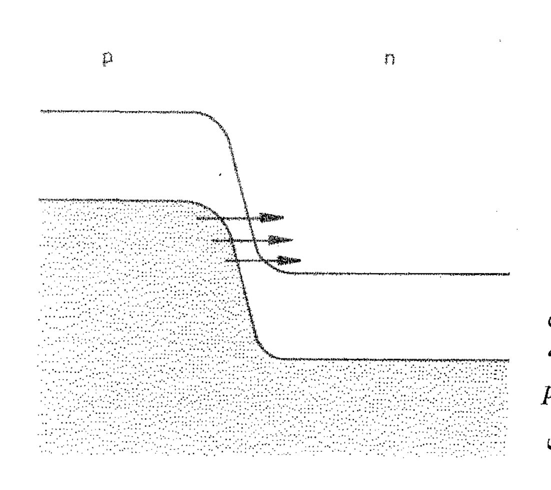
واضح‌ترین انحراف از معادلهٔ (۶-۲۲) پدیده **شکست معکوس** است؛ این پدیده عبارت است از افزایش ناگهانی جریان وقتی که تغذیهٔ معکوس از یک مقدار بحرانی ولتاژ بیشتر شود، این مقدار بحرانی برای مشخصه‌های دیودی که در شکل ۶-۵ (الف) نشان داده شده است حدود $-3V$ است. در تغذیهٔ معکوسهایی از این مرتبه، قلهٔ نوار ظرفیت در طرف p ی پیوندگاه، به گونه‌ای که در شکل ۶-۵ ب نشان داده شده است بالاتر از ته نوار رسانش در طرف n قرار می‌گیرد. بنابراین یک الکترون نوار ظرفیت در طرف p به حالتهای با همان انرژی در نوار رسانش در طرف n دسترسی دارد؛ احتمال متناهی‌ای وجود دارد که چنین الکترونی بتواند با تونل‌زنی کوانتوم مکانیکی از سدپتانسیلی که شامل ناحیهٔ مرکزی تهی‌لایه است که در آن هیچ حالت انرژی مناسبی وجود ندارد از پیوندگاه عبور کند[1]. جریان ناشی از تونل‌زنی با کاهش ضخامت سد به صورت نهایی افزایش می‌یابد و این منجر به افزایش ناگهانی در جریان به هنگام افزایش تغذیهٔ معکوس، به مقداری بیش از یک مقدار بحرانی می‌شود. این نوع شکست معکوس به **شکست زنر** معروف است و سازوکار متعارف شکست در پیوندهای p-n با آلایش سنگین‌تر است که در آنها تهی‌لایه و در نتیجه سدپتانسیل نازک‌تر است (معادلهٔ(۶-۱۶)).

با کاهش میزان آلایش، ولتاژ آستانه افزایش می‌یابد و سرانجام سازوکار شکست معکوس

۱- برای مطالعهٔ تونل‌زنی کوانتوم مکانیکی از سدهای پتانسیل به صفحهٔ ۳۸۳ کتاب فرنچ و تیلور مراجعه کنید.



(الف) شکست معکوس در دیود پیوندگاه p-n در ولت ۳- $V \approx$. توجه کنید که به علت اختلاف زیاد در مقیاس محور جریان در مقایسه با شکل ۶-۴، جریان اشباعی معکوس I_0 کوچک‌تر از آن است که دیده شود.



(ب) پیوندگاه p-n با تغذیهٔ معکوس بزرگ. شکست‌زنر زمانی رخ می‌دهد که الکترونهای نوار ظرفیت در طرف p بتوانند همان گونه که با پیکانها مشخص شده است به نوار رسانش تونل بزنند.

شکل ۶-۵

تغییر می‌کند؛ برای دیودهای سیلیسیم این تغییر در رفتار وقتی رخ می‌دهد که ولتاژ شکست به حدود ۵ ولت برسد. وقتی ولتاژ شکست افزایش یابد، میدان الکتریکی درون تهی‌لایه بزرگتر می‌شود و سرانجام به مقداری می‌رسد که در آن حاملهای درون تهی‌لایه، در فاصلهٔ بین دو برخورد، انرژی کافی برای برانگیزش یک الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش را از میدان دریافت می‌دارند، و در نتیجه یک زوج الکترون - حفره تولید می‌شود، که هر یک از اعضای آن نیز می‌توانند خود زوجهای جدیدی به همین روش تولید کنند. این سازوکار شکست به دلیل

تقویتی که در جریان ایجاد می‌کند **شکست بهمنی** نامیده می‌شود.

افزایش سریع جریان در اثر افزایش اندک ولتاژ در ناحیهٔ شکست (با هر سازوکار شکست) منجر به استفاده از پیوندگاه‌های p-n با تغذیهٔ معکوس به عنوان ولتاژ مرجع در مدارهای الکترونیکی می‌شود. پیوندگاه‌هایی که برای چنین منظوری ساخته می‌شوند **دیودهای زنر** نامیده می‌شوند. با تغییر میزان آلایش می‌توان ولتاژ شکست را از مقداری در حوالی ۲ ولت تا مقادیری حدود ۱۰۰۰ ولت تنظیم کرد.

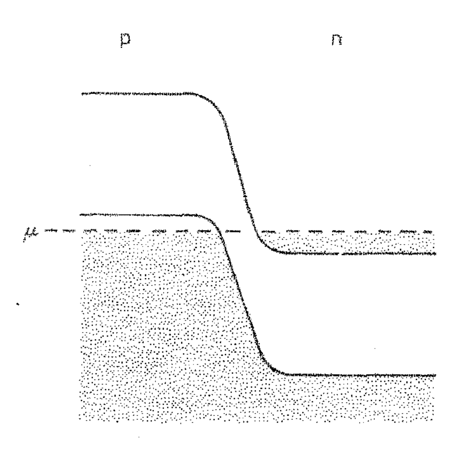
در پیوندگاه‌های p-n با آلایش بسیار سنگین، تراز فرمی می‌تواند همانند شکل ۶-۶ (الف) در طرف p درون نوار ظرفیت و در طرف n درون نوار رسانش واقع شود؛ در این صورت ته نوار رسانش در طرف n حتی با تغذیهٔ اعمالی صفر پایین‌تر از قلهٔ ظرفیت در طرف p است. در چنین شرایطی تهی لایه بسیار نازک است و با تغذیه مستقیم کوچک، همان‌گونه که در شکل ۶-۵ (ب) نشان داده شده است، جریان تونلی بزرگی مشاهد می‌شود. با افزایش تغذیهٔ مستقیم، سرانجام همپوشانی در انرژی بین نوار رسانش در طرف n و نوار ظرفیت در طرف p از بین می‌رود (نقطهٔ A در شکل ۶-۶ (ب))؛ تونل‌زنی دیگر نمی‌تواند رخ دهد و جریان به مقدار کمتر مناسب برای مشخصهٔ جریان - ولتاژ یک دیود سنتی (شکل ۶-۴) کاهش می‌یابد. قطعات با مشخصهٔ جریان - ولتاژ نظیر شکل ۶-۶ (ب) **دیودهای تونلی** نامیده می‌شوند. کاربرد آنها در مدارهای الکترونیکی ناشی از مشخصهٔ آنها در ناحیه‌ای (بین نقاط A و B در شکل ۶-۶ (ب)) است که در آن ناحیه دارای مقاومت دیفرانسیلی منفی $\frac{dV}{dI} < 0$ اند.

۶-۴ قطعات دیگر بر شالودهٔ پیوندگاه p-n

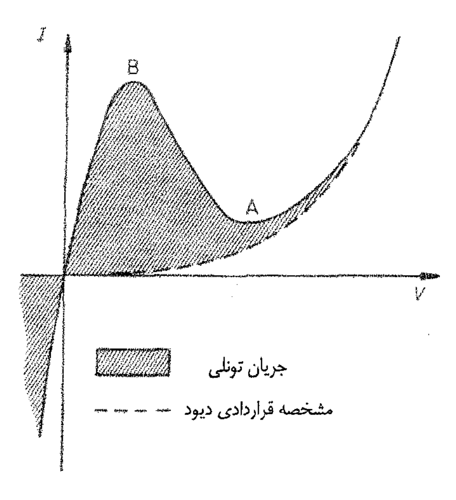
در این بخش بعضی از قطعات نیمرسانای زیادی را که دارای پیوندگاه‌های p-n هستند به اختصار توصیف می‌کنیم؛ قطعاتی را انتخاب می‌کنیم که از نقطه نظر فیزیکی جالب‌اند.

۶-۴-۱ دیودهای گسیلندهٔ نور و لیزرها

یک پیوندگاه p-n با تغذیه مستقیم متناظر است با تزریق حامل اقلیت؛ الکترونها در آن از n به درون ناحیهٔ p و حفره‌ها از p به درون ناحیهٔ n شارش می‌کنند. همان‌گونه که در بخش ۵-۶-۴ توضیح دادیم، حاملهای اقلیت اضافی در فاصله‌ای حدود یک طول پخش از لبهٔ تهی لایه با حاملهای اکثریت بازترکیب می‌شوند. اگر فرایند باز ترکیب برتر از نوع مستقیم باشد که در آن یک الکترون از نوار رسانش به یک حالت خالی در نوار ظرفیت می‌افتد، و برای پایستگی انرژی، فوتونی گسیل می‌کند، در این صورت دیود به عنوان یک چشمهٔ نور عمل می‌کند. **دیودهای گسیلندهٔ نور** (LED) از نیمرسانای با گاف نواری مستقیم ساخته می‌شوند، که در آنها



(الف) پیوندگاه p-n با آلایش سنگین و تغذیهٔ صفر. پتانسیل شیمیایی در طرف p درون نوار ظرفیت و در طرف n درون نوار رسانش قرار دارد. تونل‌زنی الکترونها از نوار ظرفیت در طرف p به نوار رسانش در طرف n ممکن است در حوالی تغذیهٔ صفر رخ دهد. برای توصیف حاملهای تبهگن باید تابع توزیع فرمی - دیراک، و نه تابع توزیع بولتزمن را به کار برد.



(ب) مشخصهٔ جریان - ولتاژ در دیود تونلی پیوندگاه p-n شکل (الف)

شکل ۶-۶

احتمال فرایندهای مستقیم بیشتر است، زیرا پایستگی اندازه حرکت در باز ترکیب، بدون دخالت ارتعاشات شبکه، قابل حصول است (بخش ۵-۴ را ببینید). انرژی اکثر فوتونها به انرژی گاف E_g نزدیک است زیرا حاملهای اضافی قبل از باز ترکیب به تعادل گرمایی می‌رسند (با انرژیهای نزدیک به لبهٔ نوار)؛ تعادل گرمایی ممکن است برای مثال از طریق برخورد با ارتعاشات شبکه (فونونها) تأمین شود و زمان متوسط بین چنین برخوردهایی معمولاً بسیار کوتاهتر از طول عمر حاملها در دمای اتاق است. با به کارگیری نیمرساناهای با گافهای نواری متفاوت، می‌توان نورهای به رنگ‌های گوناگون تولید کرد. بازده یک LED معمولاً کم است، زیرا ضریب‌شکست

بزرگ مواد نیمرسانا به آن معناست که بسیاری از فوتونهای گسیل شده در سطح بازتاب کلی می‌یابند و مجدداً درون نیمرسانا جذب می‌شوند.

در پیوندگاه‌های با آلایش بسیار سنگین، تراز فرمی در خارج تهی لایه، درون نوارهای انرژی قرار می‌گیرد (شکل ۶-۶ (الف)) را ببینید). در نتیجه حالتهای نزدیک قلهٔ نوار ظرفیت در طرف p خالی‌اند. اعمال تغذیهٔ مستقیم که اختلاف پتانسیل در تعادل گرمایی $\Delta\phi_0$ را تقریباً حذف می‌کند، باعث تزریق تعداد زیادی الکترون به حالتهای نزدیک لبهٔ نوار رسانش در طرف p می‌شود، و ممکن است همان گونه که در شکل ۶-۷ نشان داده شده است، یک وضعیت **وارونی جمعیت** حاصل شود که در آن در طرف p در مجاورت لبهٔ نوار رسانش الکترونهای بیشتری وجود دارد تا لبهٔ نوار ظرفیت. در این ناحیه، در فرایندهای باز ترکیب الکترون - حفره، فوتونهایی تولید می‌شوند. به دلیل وارونی جمعیت احتمال آنکه چنین فوتونی موجب باز ترکیب یک الکترون نوار رسانش همراه با **گسیل القایی** یک فوتون همدوس ثانوی شود بیشتر از آن است که این فوتون توسط یک الکترون نوار ظرفیت جذب شود. اگر ناحیهٔ نوع p بین آینه‌هایی محصور شود (برای این منظور بازتاب کلی داخلی که در بالا شرح آن رفت می‌تواند به کار رود) در آن صورت رهایی فوتونهای تولید شده توسط گسیل القایی مقدور نیست و دامنهٔ فوتون همدوس افزایش می‌یابد. انرژی فوتونهای گسیل شده توسط این **لیزر پیوندگاه** p-n نزدیک به گاف انرژی نیمرساناست (برای شرح کاملتر در بارهٔ فیزیک لیزر فصل ۱۷ کتاب اسمیت و تامسون[5] را ببینید). برای حصول وارونی جمعیت در یک پیوندگاه p-n ساده، جریان بسیار بزرگی لازم است؛ در بخش ۶-۶ نشان خواهیم داد که چگونه با به کار بردن یک ساختار ناهمگن سه لایه‌ای می‌توان جریان را کاهش داد.

شکل ۶-۷: اعمال تغذیهٔ مستقیم در پیوندگاه p-n شکل ۶-۶ (الف) که اختلاف پتانسیل در تعادل گرمایی $\Delta\phi_0$ را تقریباً حذف می‌کند و موجب تزریق زیاد الکترونها به حالتهای نزدیک لبهٔ نواررسانش در طرف p می‌شود. ممکن است یک وارونی جمعیت ایجاد شود که در آن تراکم الکترونها در حالتهای ته نوار رسانش بیشتر از حالتهای بالای نوار ظرفیت شود. سپس باز ترکیب توسط گسیل القایی یک فوتون می‌تواند به عمل لیزر منجر شود.

۶-۴-۲ باتریهای خورشیدی

در استفاده از پیوندگاه‌های p-n به عنوان باتریهای خورشیدی از اثر عکس آنچه که در بخش قبل بحث شد بهره‌گیری می‌شود. وقتی فوتونهای با انرژی بیش از گاف انرژی بر یک پیوندگاه p-n فرود می‌آیند، زوجهای الکترون - حفره تولید می‌شوند. الکترونهای تولید شده در تهی لایه و بسیاری از الکترونهایی که، در طرف p در فاصله‌ای درحدود طول پخش از تهی‌لایه، ایجاد می‌شوند، در اثر میدان الکتریکی موجود در این لایه به طرف n رانده می‌شوند. همین طور حفره‌های تولید شده در تهی لایه و در فاصله‌ای در حدود یک طول پخش از آن در طرف n می‌توانند به درون ناحیهٔ p رانده شوند. به این ترتیب پیوندگاه به منزلهٔ یک چشمهٔ جریان، با جریانی متناسب با شدت تابش ضروری، عمل می‌کند.

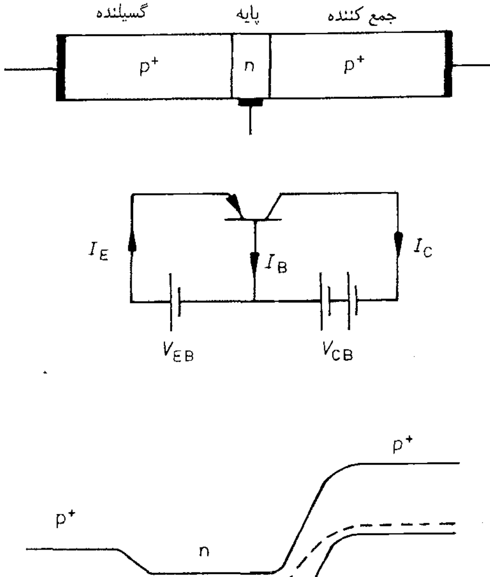
۶-۴-۳ ترانزیستور پیوندگاهی

یک ترانزیستور پیوندگاهی p-n-p، همان گونه که به طور طرحواری در شکل ۶-۸ (الف) نمایش داده شده است، از لایهٔ نازک (نازکتر از $1\mu m$) در نیمرسانای نوع n تشکیل شده، که بین دو لایهٔ نوع p با آلایش بسیار زیاد محصور شده است. این سه لایه، مطابق شکل، جمع‌کننده، پایه و گسیلنده نامیده می‌شوند و اتصال الکتریکی با هر یک از این لایه‌ها به وسیلهٔ اتصالهای فلزی انجام می‌شود. درک نیمه کمّی رفتار ترانزیستور را می‌توان با در نظرگرفتن آن به منزلهٔ دو پیوندگاه p-n، که پشت به پشت قرار دارند، به دست آورد. یک ترانزیستور پیوندگاهی n-p-n لایه‌ای از نیمرسانای نوع p دارد که بین دو لایهٔ نوع n با آلایش بسیار زیاد محصور شده است؛ رفتار آن شبیه رفتار ترانزیستور p-n-p است با این اختلاف که در آن نقش الکترونها و حفره‌ها با هم عوض می‌شوند و علامت تمامی جریانها و ولتاژها معکوس می‌شود.

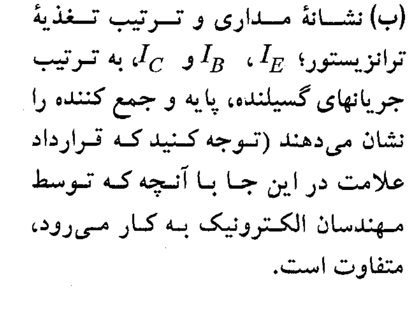
وقتی از یک ترانزیستور به عنوان تقویت کننده استفاده می‌شود، همان گونه که در شکل ۶-۸ (ب) نشان داده شده است، پیوندگاه پایه -گسیلنده تغذیهٔ مستقیم و پیوندگاه پایه - جمع کننده تغذیهٔ معکوس می‌شود؛ این امر، نمودار تراز انرژی نشان داده شده در شکل ۶-۸ (ج) را برای الکترون ایجاد می‌کند. جریان گسیلندهٔ I_E همان جریان پیوندگاه p-n با تغذیهٔ مستقیم است و با به کارگیری معادلهٔ ۶-۲۲ می‌توان آن را به صورت زیر برآورد کرد[1] :

$$I_E = I_\circ \, e^{eV_{EB}/k_B T} \qquad (۶\text{-}۲۵)$$

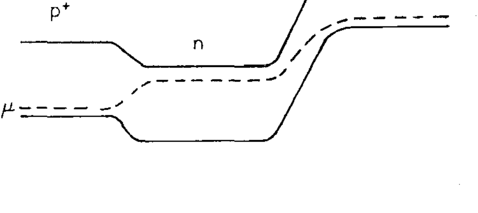
۱- به این دلیل که پهنای w_B ی ناحیهٔ پایه در مقایسه با طول پخش L_h حفره‌ها کوچک است، روش تخمین $I_\circ$ در بخش ۶-۳ دیگر معتبر نیست؛ با تعویض L_h در معادلهٔ (۶-۲۳) با w_B، برای $I_\circ$ تخمین بهتری از معادلهٔ (۶-۲۵) به دست می‌آید (مسئلهٔ ۶-۵ را ببینید).



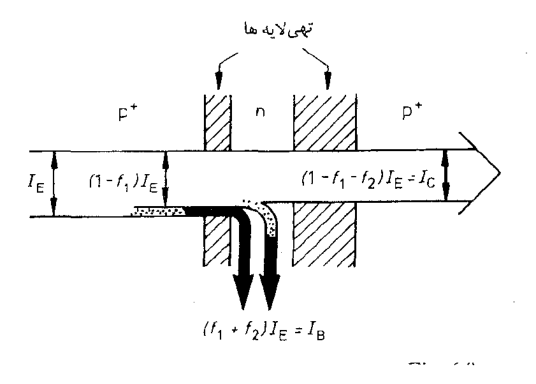
(الف) یک ترانزیستور پیوندگاهی p-n-p. شاخص روی p^+ نشانگر آن است که ناحیهٔ p آلایش بیشتری دارد.



(ب) نشانهٔ مداری و ترتیب تغذیهٔ ترانزیستور؛ I_E ، I_B و I_C، به ترتیب جریانهای گسیلنده، پایه و جمع کننده را نشان می‌دهند (توجه کنید که قرارداد علامت در این جا با آنچه که توسط مهندسان الکترونیک به کار می‌رود، متفاوت است.



(ج) اثر تغذیه روی ترازهای انرژی الکترون.



(د) جریان درون ترانزیستور با سهم الکترونی و حفره‌ای، که به ترتیب با پیکانهای سایه زده نشده و سایه زده شده مشخص شده‌اند، شارش می‌کنند؛ نواحی‌ای که درون آنها بازترکیب روی می‌دهد نقطه نقطه شده‌اند. پیکانهای الکترونی در جهت قراردادی شارش جریان است، که در جهت خلاف شارش واقعی الکترونهاست.

شکل ۶-۸

که در آن V_{EB} اختلاف پتانسیل دو سر این پیوندگاه است و فرض کرده‌ایم که سهم $-I_o$ در جریان معادلهٔ (۶-۲۵) قابل چشم‌پوشی است (که تحت شرایط کاری عادی معتبر است). فرض خواهیم کرد که کسری برابر f_1 از I_E به وسیلهٔ الکترونها و کسری برابر $1-f_1$ از آن، مطابق شکل ۶-۸ (د)، به وسیلهٔ حفره‌ها حمل شود؛ به دلیل اینکه میزان آلایندگی در گسیلنده بالاتر است،

جریان عمدتاً از شارش حفره‌ها از گسیلنده به پایه ناشی می‌شود و در نتیجه $f_1 \ll 1$. از معادلهٔ (۶-۲۵) نتیجه می‌گیریم که I_E تابعی بسیار سریع از V_{EB} است، با درج $I_o = 1nA$، در می‌یابیم که، با افزایش V_{EB} فقط به مقدار ۱۷٪ یعنی از $0/36V$ به $0/42V$، I_E با عاملی برابر ۱۰ از $1mA$ به $10mA$ افزایش می‌یابد. این خاصیت پیوندگاه p-n را می‌توان در شکل ۶-۵ (الف) نیز دید.

تزریق حفره‌ها از گسیلنده به ناحیهٔ پایه وضعیتی است از تزریق حامل اقلیت شبیه آنچه که در بخش ۵-۶-۴ مطرح شد. تفاوت مهم در ترانزیستور آن است که پهنای پایه در مقایسه با طول پخش حفره‌ها کم است، از این رو اکثریت حفره‌ها، قبل از بازترکیب، به لبهٔ تهی لایه پیوندگاه پایه - جمع‌کننده، پخش می‌شوند؛ این حفره‌ها بلافاصله، به وسیلهٔ میدان الکتریکی درون تهی‌لایه، به درون جمع‌کننده شتاب می‌گیرند (یادآوری می‌کنیم که انرژی حفره منفی انرژی الکترون است و در نتیجه، با توجه به شکل ۶-۸ (ج)، می‌بینیم که جمع‌کننده ناحیه‌ای با انرژی پایین برای حفره‌هاست).

این حفره‌ها، که به درون جمع کننده شارش می‌کنند، تنها سهم اساسی در جریان I_c جمع‌کننده را دارند، زیرا معمولاً می‌توان در مقایسه از جریان ذاتی در پیوندگاه پایه- جمع‌کننده با تغذیهٔ معکوس صرفنظر کرد. بنابراین جریان جمع‌کننده و گسیلنده تقریباً برابراند. اختلاف اندک بین آنها برابر جریان پایهٔ I_B است؛ I_B شامل دو سهم است، یکی سهم الکترونی در جریان پایه -گسیلنده $f_1 I_E$ و دیگری سهم الکترونهای جانشین آن الکترونهایی که به وسیلهٔ کسر کوچکی از حفره‌های تزریق شده، که نمی‌توانند پیش از بازترکیب، به پیوندگاه جمع‌کننده - پایه برسند، نابود می‌شوند. سهم دومی با جریان حفره و در نتیجه با جریان کل گسیلنده متناسب است؛ آن را به صورت $f_2 I_E$ می‌نویسیم که در آن $f_2 \ll 1$ [شکل ۶-۸ (د) را ببینید]. بنابراین

$$I_B = (f_1 + f_2) I_E \ll I_E$$

$$I_C = I_E - I_B = (1 - f_1 - f_2) I_E \approx I_E \qquad (۶\text{-}۲۶)$$

نسبت I_E / I_B را با β نمایش داده و **بهرهٔ جریان** ترانزیستور نامیده می‌شود. از معادلات (۶-۲۶) می‌بینیم که

$$\beta = \frac{1}{f_1 + f_2} \gg 1$$

مقدار نوعی β برابر ۱۰۰ است. از آنجا که تغییر اندک i_β در جریان پایه با تغییری به مراتب بزرگتر i_β $(\beta - 1)$ در جریان جمع‌کننده همراه است، از معادلات (۶-۲۶) دیده می‌شود که ترانزیستور را می‌توان به عنوان یک تقویت کنندهٔ جریان با بهرهٔ β-۱ به کار برد.

یک تقویت کننده آرمانی جریان باید امپدانس ورودی صفر و امپدانس خروجی نامتناهی داشته باشد. امپدانس ورودی، $\partial V_{EB} / \partial I_B$، که در پیوندگاه پایه - گسیلنده مشاهده می‌شود،

(برای $T = ۳۰۰K$، $I_E = ۵mA$ و $\beta = ۱۰۰$) برابر است با

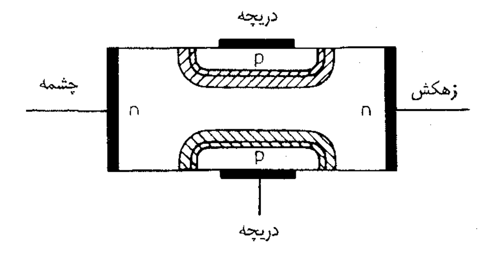
$$\frac{\partial V_{EB}}{\partial I_B} = \frac{\partial V_{EB}}{\partial I_E} \frac{\partial I_E}{\partial I_B} = \frac{k_B T\beta}{e I_E} = ۵۰۰\,\Omega$$

که در آن معادلات (۶-۲۵) و (۶-۲۶) را به کار برده‌ایم. بنابر مدل سادهٔ حاضر، امپدانس خروجی نامتناهی است، زیرا جریانهای گسیلنده و جمع‌کننده، به شرط آنکه تغذیهٔ معکوس برقرار باشد، مستقل از ولتاژ جمع کننده - گسیلنده V_{CE} هستند. در عمل افزایشی در V_{CE} باعث می‌شود تهی لایه در پیوندگاه پایه - جمع‌کننده گسترش یابد و در نتیجه پهنای ناحیهٔ پایه کاهش یابد؛ این امر موجب می‌شود که مقدار I_o در معادلهٔ (۶-۲۵) زیاد شود (پانوشت صفحهٔ ۲۱۰ را ببینید) و از این رو I_E و I_C اندکی افزایش یابند. امپدانس خروجی حاصل نوعاً حدود $۵k\Omega$ است. ترانزیستور را می‌توان، با ایجاد امکان شارش جریان جمع‌کننده از یک مقاومت مناسب، به یک تقویت‌کنندهٔ ولتاژ تبدیل کرد؛ در آن صورت تغییرات در جریان جمع‌کننده حاصل از تغییرات در V_{CE} از طریق معادلهٔ (۶-۲۵)، به تغییرات در اختلاف ولتاژ دو سر مقاومت تبدیل می‌شود.

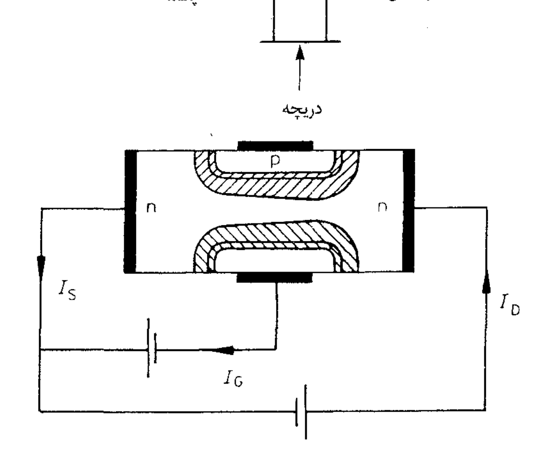
۶-۴-۴ ترانزیستور اثر میدانی پیوندگاه - دریچه

شکل ۶-۹ (لف) نمودار طرحواری از یک ترانزیستور اثر میدانی پیوندگاه- دریچهٔ کانال n (یا $JUGFET$) [1] است. اتصالهای چشمه و زهکش به وسیله کانال رسانای پیوسته‌ای از نیمرسانای نوع n به هم مرتبط‌اند. شارش جریان از این کانال را می‌توان با تغییر دادن تغذیهٔ معکوس اعمال شده بر دریچهٔ نوع p تنظیم کرد. شکلهای ۶-۹ (ب) و (ج) نشانهٔ مداری متعارف و ترتیب تغذیهٔ عادی این نوع از $JUGFET$ را نشان می‌دهند. مقایسهٔ شکلهای ۶-۹ (الف) و (ج) نشان می‌دهد که پهنای تهی‌لایهٔ بین نواحی p و n به وسیلهٔ تغذیهٔ معکوس افزایش می‌یابد و بنابراین مساحت سطح برای شارش جریان از کانال n کم می‌شود. تغییرات در پتانسیل دریچه باعث تغییرات در ضخامت تهی‌لایه می‌شود و از آنجا که این ناحیه، ناحیه‌ای است با مقاومت الکتریکی زیاد، تغییرات متناظری در مقاومت کانال بین زهکش و چشمه به وجود می‌آید. یک ولتاژ دریچه منفی به قدر کافی بزرگ، یا یک ولتاژ زهکش یا چشمهٔ مثبت به قدر کافی بزرگ، می‌تواند باعث گسترش تهی لایه در تمامی طول کانال شود. این وضعیت تنگش (*Pinch-off*) نامیده می‌شود. وقتی از $JUGFET$ به عنوان تقویت کنندهٔ ولتاژ استفاده شود، ولتاژ دریچه را تغذیه می‌کند؛ تغییرات حاصل در مقاومت کانال موجب تغییراتی در جریان زهکش - چشمه و در نتیجه تغییراتی در ولتاژ دو سرمقاومت بار متوالی با کانال می‌شود. مزیت اصلی یک تقویت کنندهٔ ولتاژ $JUGFET$ آن است که مقاومت ورودی همان مقاومت پیوندگاه p-n با تغذیهٔ معکوس و

۱- *Junction-gate field-effect transistor*



(الف) یک $JUGFET$ کانال n؛ دریچه و ناحیهٔ p حلقه‌ای را می‌سازند که کانال n را دور می‌زند. ناحیهٔ هاشورزده نشانگر پهنای تهی لایهٔ مناسب برای تغذیهٔ صفر است.



(ب) نشانهٔ مداری یک $JUGFET$ کانال n.

(ج) ترتیب تغذیهٔ عادی برای $JUGFET$ کانال n، و اثر آن روی پهنای تهی لایه؛ جریان دریچه I_G کوچک است به طوری که جریان زهکشی I_D و جریان چشمه I_S بسیار نزدیک هم‌اند.

شکل ۶-۹

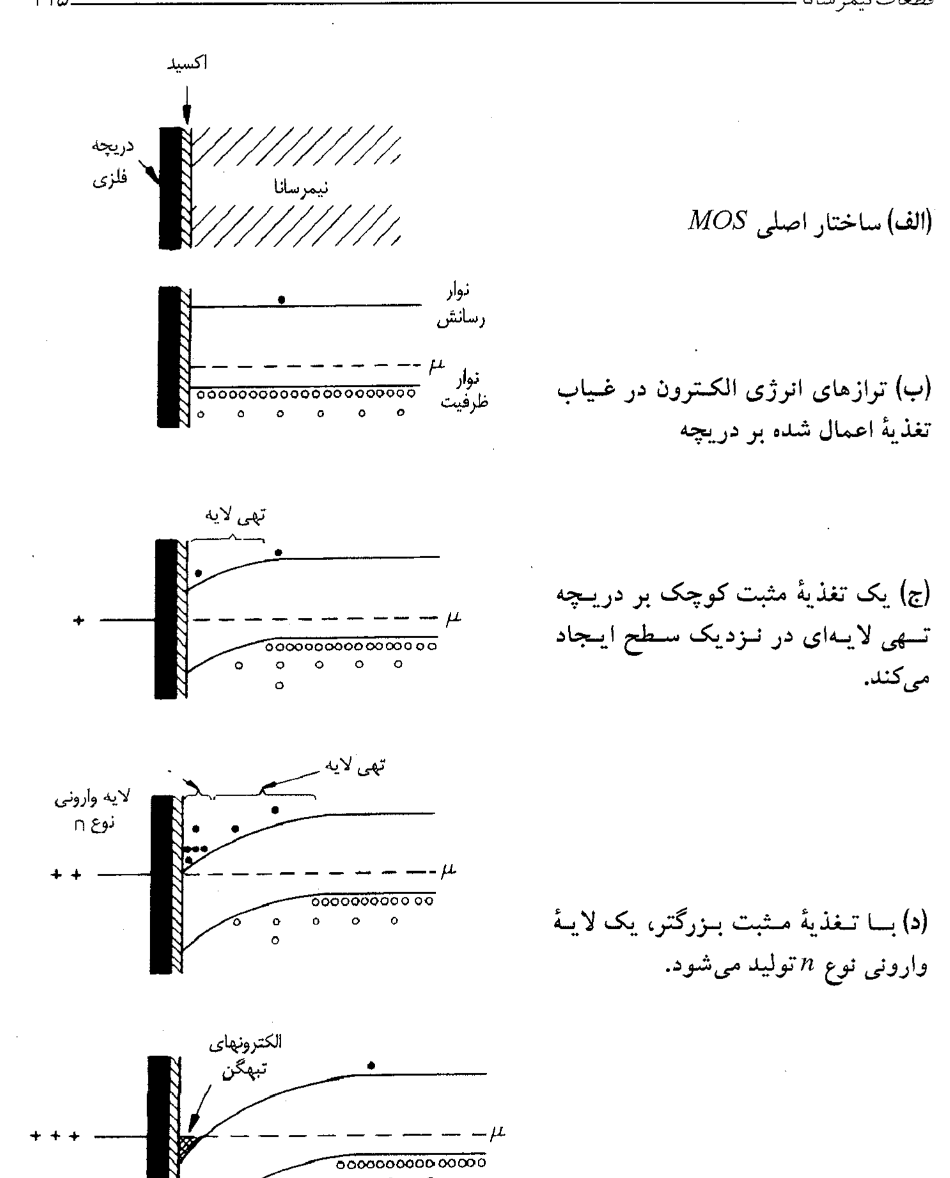
در نتیجه بسیار بزرگ است؛ بنابراین جریان دریچه بسیار کوچک است.

۶-۵ فن‌آوری فلز-اکسید-نیمرسانا و ماسفت *(MOSFET)*

فن‌آوری فلز - اکسید - نیمرسانا *(MOS)*[1] نام خود را از ساختار اصلی‌ای، که در شکل ۶-۱۰ (الف) نشان داده شده است، می‌گیرد که در آن یک الکترود فلزی (موسوم به دریچه) به وسیلهٔ لایهٔ نازکی از مادهٔ عایق، از یک زیر لایهٔ نیمرسانا، جدا می‌شود. متداولترین قطعات MOS زیر لایهٔ سیلیسیم و عایق اکسید سیلیسم است. ساختاری که در شکل ۶-۱۰ (الف) نشان داده شده است، مفید است، زیرا با اعمال یک پتانسیل به دریچه، می‌توان خواص نیمرسانا را در مجاورت سطح تغییر داد.

برای نمایش این موضوع فرض می‌کنیم زیر لایهٔ نوع p ضعیف است و در غیاب یک پتانسیل وارد بر دریچه، نمودار تراز انرژی برای الکترونها مطابق شکل ۶-۱۰ (ب) است؛ دایره‌های

۱- *Metal-oxide-semiconductor*



(الف) ساختار اصلی MOS

(ب) ترازهای انرژی الکترون در غیاب تغذیهٔ اعمال شده بر دریچه

(ج) یک تغذیهٔ مثبت کوچک بر دریچه تهی لایه‌ای در نزدیک سطح ایجاد می‌کند.

(د) با تغذیهٔ مثبت بزرگتر، یک لایهٔ وارونی نوع n تولید می‌شود.

(هـ) تغذیهٔ مثبت باز هم بزرگتر بر دریچهٔ الکترونهای در لایهٔ وارونی تبهگن می‌شوند.

شکل ۶-۱۰

توپرو توخالی، به ترتیب، الکترونها و حفره‌ها را نمایش می‌دهند. وقتی، مطابق شکل ۶-۱۰ (ج) پتانسیل مثبتی بر دریچه اعمال شود، حفره‌ها از سطح به سوی درون نیمرسانا رانده و الکترونها به سوی سطح جذب می‌شوند. برای پتانسیل اعمال شدهٔ کوچک، شمار الکترونها، که

حامل اقلیت‌اند، کم است و در نتیجه، ناحیه‌ای با تعداد اندک حامل بار در مجاورت سطح تولید می‌شود؛این ناحیه را **تهی لایه** می‌گویند و خواصی مشابه تهی لایه در پیوندگاه p-n، از قبیل مقاومت الکتریکی زیاد، دارد (بخش ۶-۲ را ببینید).

در تهی‌لایه، چگالی بار منفی خالص موجود است، زیرا چگالی بار ناخالصیهای پذیرندهٔ یونیدهٔ دیگر به وسیلهٔ چگالی بار حفره‌ها جبران نمی‌شود. همانند پیوندگاه p-n، این چگالی بار $\rho(x)$ از طریق معادلهٔ پواسون [معادلهٔ (۶-۴)]، با پتانسیل الکترواستاتیکی متغیر $\phi(x)$ همراه است. چون $\rho(x)$ به تراکم الکترونها و حفره‌ها بستگی دارد، و اینها نیز به نوبهٔ خود از طریق معادلات (۶-۱۰) به $\phi(x)$ بستگی دارند، به معادله‌ای غیرخطی برای $\phi(x)$ می‌رسیم که در حالت کلی باید با استفاده از روشهای عددی حل شود. پتانسیل تابع مکان حاصل از حل معادلهٔ (۶-۴) باعث می‌شود که نوارهای انرژی در نزدیکی سطح، درست همانند تهی‌لایهٔ پیوندگاه p-n خم شود؛ در نتیجه نمودار ترازهای انرژی الکترونی شکل ۶-۱۰ (ج) را به دست می‌آوریم. از آنجا که هیچ شارش خالص از الکترونها و حفره‌ها وجود ندارد. پتانسیل شیمیایی باید، همان طور که در شکل نشان داده شده است، ثابت باشد.

افزایش تغذیهٔ مثبت اعمالی دریچه، نوارهای انرژی را بیشتر خم می‌کند تا اینکه لبهٔ نوار رسانش در سطح، مطابق شکل ۶-۱۰ (د)، به پتانسیل شیمیایی نزدیک می‌شود. در آن صورت چگالی الکترونی نوار رسانش در مجاورت سطح، مطابق شکل، قابل ملاحظه می‌شود. از این رو لایه‌ای نزدیک سطح هست که در آن رسانندگی الکتریکی زیاد است. این لایه به لایهٔ وارونی موسوم است، زیرا، درون آن، رفتار اساساً از نوع p به نوع n تغییر کرده است. تهی لایهٔ با مقاومت زیاد، که در آن تعداد اندکی حامل بار وجود دارد، به سوی درون نیمرسانا جابه‌جا شده است و در آنجا لایهٔ وارونی نوع n را از زیر لایهٔ نوع p جدا می‌کند؛ تشابه با پیوندگاه p-n باز هم قوی‌تر می‌شود.

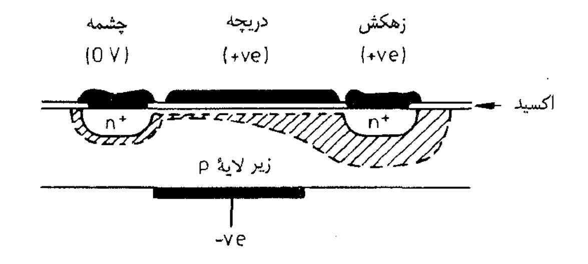
به این دلیل که الکترونها در لایهٔ وارونی مقید به حرکت در لایهٔ نازکی مجاور سطح هستند، رفتار آنها اغلب مانند رفتار گاز الکترونی دو بعدی است؛ پیامدهای فراتر این مطلب را در فصل ۱۴ توضیح خواهیم داد. چگالی الکترونهای درون لایهٔ وارونی و در نتیجه رسانندگی این لایه، با افزایش پتانسیل مثبت اعمالی بر دریچه زیاد می‌شود. برای پتانسیلهای به قدر کافی بزرگ، پتانسیل شیمیایی، مطابق شکل ۶-۱۰ (هـ)، درون نوار رسانش مجاور سطح واقع می‌شود و در آن صورت گاز الکترونی دو بعدی تبهگن می‌شود و ضریب اشغال حالتها، به جای توزیع بولتزمن [معادلهٔ (۶-۱۰)] با تابع فرمی [معادلهٔ (۳-۱۴)] بیان می‌شود.

مدولاسیون رسانندگی الکترونهای لایهٔ وارونی به وسیلهٔ پتانسیل دریچه، عمل ترانزیستور اثر میدان فلز-اکسید-نیمرسانا (*MOSFET*) را توجیه می‌کند. مقطعی از یک ماسفت

(*MOSFET*) در شکل ۶-۱۱ نشان داده شده است؛ پهنای نشان داده شده برای تهی لایه مناسب ولتاژهای تغذیهٔ نشان داده شده است. ساختار شکل ۶-۱۰ (الف) را می‌توان در مرکز وجه فوقانی در شکل ۶-۱۱ مشاهده کرد. نواحی نوع n مجاور اتصالهای زهکش و چشمه بسیار بیش از زیر لایه آلاییده‌اند و در نتیجه در شکل با n^+ نمایش داده شده‌اند؛ این نواحی وسیله‌ای برای برقراری تماس با لایهٔ وارونی نوع n فراهم می‌سازد تا جریانی از آن بگذرد. توجه کنید که تهی لایه‌های پیوندگاه‌های p-n^+ به تهی لایهٔ ایجاد شده به وسیلهٔ تغذیهٔ دریچه طوری متصل می‌شود که مسیر رسانندگی نوع n به طور کامل از زیر لایهٔ نوع p عایق‌بندی می‌شود. تغذیهٔ منفی روی الکترود زیر لایه ابزار دیگری برای تنظیم این لایه را تدارک می‌بینند؛ این الکترود، به شرط آن که هر دو پیوندگاه p-n^+ در تغذیهٔ معکوس باقی بمانند، جریان بسیار کمی می‌گیرند.

همان‌گونه که تشابه در نامگذاری اتصالها تداعی می‌کند، *JUGFET* (بخش ۶-۴-۴) و *MOSFET*، در مدارهای الکترونیکی بسیار شبیه هم عمل می‌کنند. کاربرد وسیعتر *MOSFET* در مدارهای مجتمع به واسطهٔ آسانی نسبی ساخت تعداد زیادی *MOSFET* درون مساحت کوچکی روی سطح برهٔ نازکی از سیلیسیم است. سایر مؤلفه‌های مدار، از قبیل ترانزیستورهای پیوندگاهی، مقاومتها و خازنها را می‌توان اساساً با به‌کارگیری روشهای تولید مشابه، روی سطح ساخت و لذا ساخت مدارهای مجتمع، به منظور تحقق بسیاری از کاربریهای متفاوت، امکانپذیر است. در حال حاضر ساخت مدارهایی حدود 10^5 مؤلفهٔ مجزا در هر میلی مترمربع شدنی است و احتمال می‌رود این چگالی در آینده بازهم بیشتر شود.

ساختار *MOS* اصلی شکل ۶-۱۰ (الف) در صورتی به طریقی که در بالا بیان کردیم عمل خواهد کرد که رفتار لایهٔ سطحی به وسیلهٔ پتانسیل دریچه تنظیم شود نه به وسیلهٔ بارهای واقع



شکل ۶-۱۱: مقطعی از یک *MOSFET* کانال n. قسمت سایه زده شده تهی لایهٔ مناسب ولتاژهای تغذیهٔ مشخص شده را نشان می‌دهد. کانال وارونی نوع n را می‌توان مشاهده کرد، که بین تهی لایه و لایهٔ اکسید واقع در زیر الکترود و دریچه محصور شده است. اتصالهای الکتریکی به الکترودهای فلزی را می‌توان به کمک نوارهای فلزی، که روی سطح تبخیر شده‌اند، فراهم ساخت.

بر سطح . چگالی بار سطحی ناخواسته ممکن است از الکترونهای موجود در حالتهای جایگزیدهٔ مجاور سطح حاصل شود؛ انرژی این حالتها اغلب درون گاف انرژی نیمرسانا واقع است. هم‌چنین تعداد زیاد پیوندهای کووالان اشباع نشده روی سطح برهنهٔ نیمرسانا باعث می‌شود سطح از نظر شیمیایی بسیار واکنشگر و مستعد آغشته شدن با اتمهای ناخالصی باشد(بخش ۱۲-۶)؛ این ناخالصیهای شیمیایی، به طور کلی، یک چگالی بار سطحی به همراه دارند. مقیاس این مسئله با توجه به این امر مشخص می‌شود که حدود 10^{13} اتم نیمرسانا در هر میلی‌متر مربع از سطح (و در نتیجه همین تعداد از پیوندهای کووالان اشباع نشده) وجود دارد، در حالی که چگالی بار برابر 10^{11} بار الکترونی در هر میلی‌مترمربع کافی است تا دریچه را از تعیین رفتار سطح منع کند.

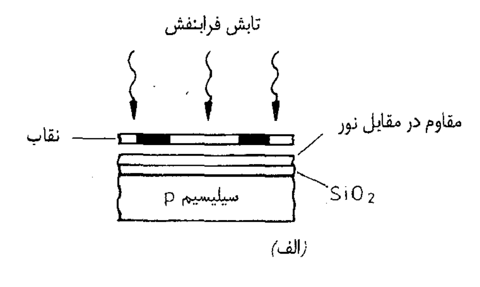
هم چنین مهم است که سطح تخت و عاری از نقائص باشد، در نتیجه تحرک حاملها در تهی لایه نباید به طور جدی به وسیلهٔ پراکندگی افزایش یافته، کاهش یابد. شیوهٔ تهیهٔ سطح را که در زیر خواهد آمد، می‌توان به کاربرد. برهٔ نازکی از سیلیسیم با یک ارهٔ الماسی بریده می‌شود و سطح آن صیقل داده می‌شود تا جلایی آینه‌ای پیدا کند. سپس این سطح، صیقل شیمیایی (سونش) داده می‌شود تا کرنش مادهٔ حاصل از فرایندهای اره کردن و صیقل دادن برطرف شود. سرانجام این سطح با ته نشست لایه‌ای از یک اکسید سیلیسیم محافظ پوشانده می‌شود. به این طریق می‌توان چگالی بار سطحی ناخواسته را تا حدود 10^{8} بار الکترونی به ازای یک میلی‌متر مربع کاهش داد. برای ساختن *MOSFET* روی این سطح بکر سیلیسیم می‌توان رشتهٔ عملیاتی را، که در شکل ۶-۱۲ توصیف شده است، دنبال کرد.

به *MOSFET* توصیف شده در بالا *MOSFET* **تقویت کانال** n گفته می‌شود، زیرا لازم است که پتانسیل مثبت به دریچه اعمال شود تا کانالی از نوع n با رسانندگی تقویت شده ایجاد شود. تهیهٔ یک سطح نیمرسانا با مقدار تنظیم شده‌ای برای چگالی بار سَطحی نیز امکانپذیر است. مقدار درست چگالی بار مثبت روی سطح نیمرسانا در ساختار *MOS* شکل ۶-۱۰ (الف) می‌تواند موجب خمیدگی نوارهای انرژی به سوی پایین شود، به طوری که در غیاب پتانسیل اعمالی بر دریچه، لایهٔ وارونی نوع n موجود باشد. در این وضع اعمال یک پتانسیل منفی بر دریچه، لایهٔ وارونی و در نتیجه کانال رسانش نوع n را از بین می‌برد. قطعه‌ای که از این امکان بهره می‌گیرد به *MOSFET* **تهی کانال** n موسوم است. برای خواننده حیرت‌آور نخواهد بود که بداند قطعات *MOS* کانال p هم وجود دارند که در آنها نقش الکترونها و حفره‌ها با هم عوض می‌شود.

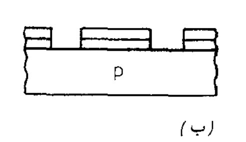
۶-۶ برآرستی با باریکهٔ مولکولی و پیوندگاه‌های ناهمگن نیمرسانا

گسترش روش برآرستی با باریکهٔ مولکولی (*MBE*) برای رشد برآرستی[1] مادهٔ نیمرسانای تازه

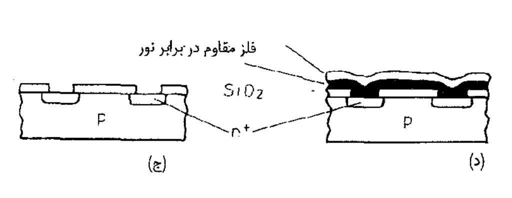
۱- یک فرایند رشد برآرستی فرایندی است که در آن ترتیب اتمها در مادهٔ جدید اضافه شده ادامه‌ای است



(الف) سطح اکسید با لایه‌ای از لعاب مقاوم در مقابل نور پوشانده شده است. تابش فرابنفش لایهٔ مقاوم در مقابل نور را، بجز در قسمتهایی، که به وسیلهٔ نواحی مات نقاب محافظت شده، سخت می‌کند.



(ب) لایهٔ سخت نشدهٔ مقاوم در مقابل نور، در حلال مناسبی حل می‌شود. SiO_2ی تابش دیده به وسیلهٔ HF سونش داده می‌شود.



(ج) لایهٔ باقیماندهٔ مقاوم در مقابل نور، حل می‌شود. اتمهای بخشندهٔ مناسب به درون نواحی Si ، که لایهٔ اکسید از روی آنها پاک شده است، پخش می‌شوند. این کار نواحی دریچهٔ n^+ و چشمه را ایجاد می‌کند.
(د) یک فیلم فلزی نازک روی تمام سطح تبخیر می‌شود و این با لایهٔ دیگری از مادهٔ مقاوم در مقابل نور پوشانده می‌شود. در معرض تابش فرابنفش قرار گرفتن، از طریق یک نقاب مناسب، موجب می‌شود، نواحی لایهٔ فلزی به طور انتخابی طی مراحل (الف) و (ب) برداشته شوند. به این ترتیب نقش الکترود درشکل ۶-۱۱ به وجود می‌آید.

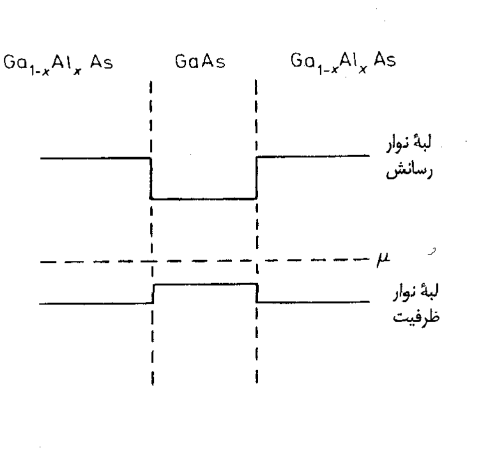
شکل ۶-۱۲: فرایندهایی که برای ایجاد یک $MOSFET$ کانال n بر سطح برهٔ نازکی از Si به کار می‌رود.

از ساختار بلور منظم اژ زیر لایه. در فرایند **برآرستی فاز بخار و فاز مایع** (که به ترتیب با *VPE* و *LPE* نمایش داده می‌شوند) مادهٔ جدید، به ترتیب، از فازهای گازی و مایع نشانده می‌شود. **MBE (Molecular Beam Epitaxy)** روش پیچیده‌تری از رشد برآرستی را فراهم می‌سازد.

روی یک زیر لایه، امکان ساخت ساختارهای نیمرسانایی را، که در آنها ترکیب شیمیایی در مقیاس طول اتمی تغییر می‌کند، فراهم کرده است. در این روش مادهٔ جدید به شکل باریکه‌ای از اتمها بر زیر لایه فرود می‌آید؛ برای هر یک از عناصر موجود در باریکه، چشمهٔ مجزایی به کار می‌رود به طوری که تغییر دادن مقادیر نسبی عناصر مختلفی که بر زیر لایه فرود می‌آیند، امکانپذیر است. به این طریق، ترکیب شیمیایی مادهٔ جدید را می‌توان تنظیم کرد و تغییر داد؛ آهنگ رشد معمولاً در گسترهٔ ۱ تا $۱۰\,\mathring{A}s^{-۱}$ است. دمای زیر لایه برای رشد برآرستی خوب، باید به قدر کافی بالا باشد، ولی باید آن قدر هم پایین باشد تا از پخش اتمهای ته نشست شده به فواصلی قابل ملاحظه جلوگیری کند. مثالی برای انواع ساختارهایی که می‌توان، با به کارگیری این روش، ساخت در شکل ۶-۱۳ نشان داده شده است؛ لایه‌ای از $GaAs$ بین دو لایه از $Ga_{۱-x}Al_xAs$ ($۰ < x < ۱$ و به طور نوعی $x \sim ۰/۳$) محصور شده است. وجه‌های مشترک (که به **پیوندگاه‌های ناهمگن** موسومند، زیرا بین دو نیمرسانای مختلف هستند) در مقیاس طول اتمی تیزاند و لایه‌هایی به نازکی چندین فاصلهٔ اتمی را می‌توان ساخت.

حال پیرامون انگیزهٔ تولید چنین ساختاری بحث می‌کنیم. $GaAs$ ساختار بلوری بلند روی (ZnS) دارد (شکل ۱-۱۵) و $Ga_{۱-x}Al_xAs$ نیز دارای همین ساختار است با این تفاوت که در آن کسر برابر x از اتمهای Ga مستقیماً با اتمهای Al تعویض شده‌اند. از آنجا که Ga و Al هر دو در گروه III جدول دوره‌ای قرار دارند، $Ga_{۱-x}Al_xAs$ نیز یک نیمرسانای III-V است، ولی گاف انرژی آن، به ترتیب، با تغییر x از ۰ تا ۱، از ۱/۴۲ تا $۲/۱۶eV$ تغییر می‌کند؛ نقاط انتهایی این گستره، به ترتیب، به $GaAs$ و $AlAs$ تعویض نشده مربوط می‌شوند. گاف انرژی بزرگتر مربوط به $Ga_{۱-x}Al_xAs$، نمودار تراز انرژی الکترونها را، که در شکل ۶-۱۳ نشان داده شده است؛ توجیه می‌کند.

این نمودار تراز انرژی امکانات جالب توجه بسیاری را فراهم می‌کند. لبهٔ نوار رسانش یک چاه پتانسیل مربعی متناهی برای الکترونها فراهم می‌کند؛ لبهٔ نوار ظرفیت چاه مشابهی را برای حفره‌ها تأمین می‌کند. اغلب دوره‌های درسی مکانیک کوانتومی مقدماتی شامل محاسبات مربوط به حالتهای مقید ذرات در چاههای پتانسیل مربعی یک بعدی است و ساختار چند پیوندگاه ناهمگن نیمرسانا در شکل ۶-۱۳ دستگاهی تجربی را تدارک می‌بینند که در آن نتایج حاصل از این محاسبات را می‌توان آزمود. البته ساختار پیوندگاه ناهمگن مطلقاً یک بعدی نیست، چرا که در آن الکترونها و حفره‌ها آزادند در صفحهٔ لایهٔ $GaAs$ حرکت کنند؛ ولی این تفاوت را، همان گونه که در فصل ۱۴ ثابت خواهیم کرد، می‌توان به سادگی توجیه کرد. به این دلیل که حاملهای بار در حالتهای مقید، محدود به حرکت به موازات لایهٔ $GaAs$ هستند، رفتارشان اساساً، در صورتی که این لایه به قدر کافی نازک باشد، دو بعدی



شکل ۶-۱۳ : ساختار پیوندگاه ناهمگن مشتمل بر لایۀ نازکی از $GaAs$ که بین دو ناحیۀ $Ga_{1-x}Al_x As$ محصور شده است. ترازهای انرژی الکترون نیز نشان داده شده‌اند. انتقال بار بین $GaAs$ و $Ga_{1-x}Al_x As$ به طور کلی لازم است تا سبب هم خط شدن پتانسیل شیمیایی μ شود، ولی در مورد لایه‌های با آلایش بسیار ضعیف چگالی بار حاصل باعث خمیدگی قابل ملاحظه‌ای در لبه‌های نوار، در مقیاس طول نشان داده شده در شکل، نمی‌شود (در هر حال شکل ۶-۱۴ را ببینید).

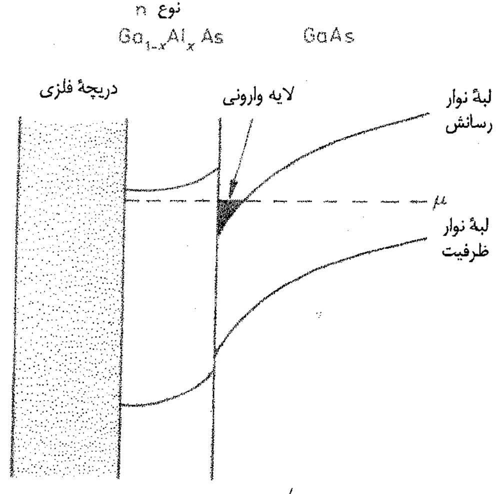
است. در نتیجه ساختار پیوندگاه ناهمگن شکل ۶-۱۳ را می‌توان به جای $MOSFET$، برای مطالعۀ دستگاههای دو بعدی الکترونی، به کار برد و به این امکان در فصل ۱۴ بیشتر خواهیم پرداخت.

ساختارهای پیچیده‌تر از آنچه که در شکل ۶-۱۳ نشان داده شده است را نیز می‌توان با شگرد MBE ساخت. یک امکان آن است که آرایه‌ای منظم از لایه‌های یک در میان از $GaAs$ و $Ga_{1-x}Al_x As$ بسازیم. حاصل این عمل افزودن یک دوره بر دستگاه حالت جامد، علاوه بر دوره‌های موجود در ساختار بلورین بنیادین آن است. اغلب به دستگاه‌های حاوی چنین دورۀ اضافی **ابرشبکه** گفته می‌شود. یک پیامد جالب توجه وجود ابر شبکه، پدیدار شدن گافهای نواری در روابط پاشندگی ε/k الکترونها به ازای مقادیری از k است که در آنها دورۀ تابع موج الکترونها با دورۀ ابر شبکه یکی است. این گافهای نواری شبیه گافهایی هستند که در مرزهای منطقۀ بریلوئن پدیدار می‌شوند که در آنجا دورۀ تابع موج الکترون با دورۀ شبکۀ بلور یکی می‌شود (بخش ۴-۱ را ببینید). چون دورۀ ابرشبکه بزرگتر از دورۀ شبکۀ بلور است؛ گافهای نواری حاصل از ابر شبکه در مقادیر kی کوچکتر از مقادیر kی مربوط به شبکۀ بلور رخ می‌دهند.

به این دلیل که تحرک الکترونهای نوار رسانش در $GaAs$ بسیار بالا است، اغلب از این ماده در آن دسته دستگاه‌های نیمرسانا استفاده می‌شود که در آنها کار با بسامد بالا یا قطع و وصل سریع مورد نیاز است. یک مشکل آن است که اگر الکترونها به وسیلۀ اتمهای بخشنده تأمین شوند، در آن صورت تحرک حامل بار به وسیلۀ پراکندگی الکترونها توسط اتمهای بخشندۀ پونیده، کاهش

می‌یابد. با استفاده از یک ساختار پیوندگاه ناهمگن موسوم به **ترانزیستور با تحرک الکترونی زیاد** *(HEMT)*[1]، می‌توان بر این مشکل غلبه کرد. قسمت اصلی این ترانزیستور در شکل ۶-۱۴ نشان داده شده است. لایهٔ نازکی (با ضخامت حدود Å ۵۰۰) از $Ga_{1-x}Al_xAs$ نوع n بین الکترود فلزی دریچه و لایهٔ ضخیمی از $GaAs$ خالص محصور شده است، بخشنده‌ها، در فرایند *MBE* با افزودن اتمهای آلاینده به باریکهٔ اتمی، وارد $Ga_{1-x}Al_xAs$ می‌شوند. رفتار ساختار شکل ۶-۱۴ مشابه رفتار ساختار *MOS* نشان داده شده در شکل ۶-۱۰ است؛ پتانسیل اعمالی بر دریچهٔ فلزی، رسانندگی لایهٔ وارونی نوع n در سطح را معین می‌کند. وارسی نمودار انرژی الکترون شکل ۶-۱۴ نشان می‌دهد که، گرچه الکترونهای موجود در لایهٔ وارونی به وسیلهٔ بخشنده‌های موجود در $Ga_{1-x}Al_xAs$ تأمین می‌شوند، خود این لایه درون $GaAs$ قرار دارد، این به آن علت است که حالتهای نوار رسانش درون $GaAs$ انرژی پایین‌تری دارند. از آنجا که حاملهای بار به طور فیزیکی از اتمهای بخشنده فاصله دارند، تحرک آنها به وسیلهٔ پراکندگی بخشنده کاهش نمی‌یابد.

پتانسیل الکترواستاتیکی، که منجر به لبهٔ نوار در شکل ۶-۱۴ می‌شود را می‌توان، درست مانند پیوندگاه p-n (بخش ۶-۲)، به کمک معادلهٔ پواسون [معادلهٔ (۶-۴)] و چگالی بار، محاسبه کرد. چگالی بار در $Ga_{1-x}Al_xAs$ به طور عمده برابر چگالی بار بخشنده‌های یونیدهٔ مثبت است؛ چگالی بار در $GaAs$ از الکترونهای موجود در لایهٔ وارونی و پذیرنده‌های یونیدهٔ منفی ناشی می‌شود ($GaAs$ را از نوع pی ضعیف برمی‌گزینیم). بنابراین انحنای نوارها در این دو ناحیه در جهت‌های خلاف هم هستند. چون تراکم الکترونی به پتانسیل بستگی دارد، لازم است اطمینان حاصل کنیم که تراکم



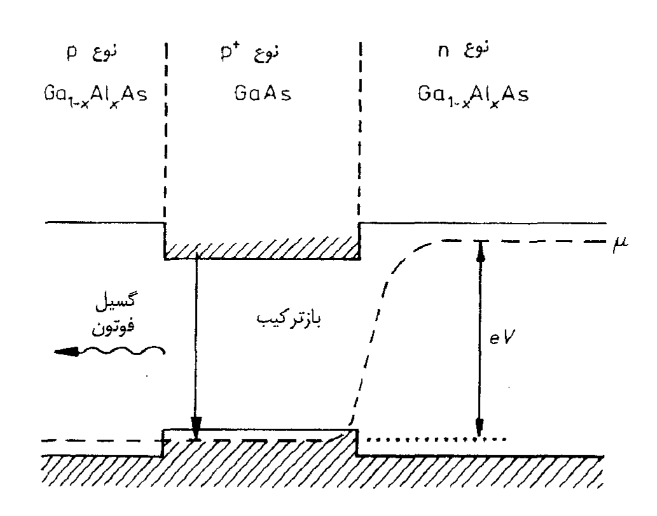
۶-۱۴ : ترازهای انرژی الکترون در یک ***HEMT*****، که تشکیل لایهٔ وارونی کانال** n **را نشان می‌دهد. اتصال به این کانال از طریق الکترودهای زهکش و چشمه مانند** ***MOSFET*** **در شکل ۶-۱۱، برقرار می‌شود.**

[1] – *High-electron-mobility transistor*

الکترونی، که در معادلهٔ پواسون درج می‌شود، تراکم مناسب برای پتانسیل حاصل از حل این معادله باشد. به خاطر کوچکی مقیاس طول تغییرات پتانسیل در *HEMT*، دستیابی به این در بایست خود سازگار اغلب کاملاً پیچیده است؛ به همین دلیل، معادلات (۶-۱۰) تراکم الکترونی را به طور کافی به پتانسیل مربوط نمی‌کنند. در عوض چگالی بار الکترون باید از حل معادلهٔ شرودینگر، برای توابع موج الکترون موجود در لایهٔ وارونی به دست آید.

امروزه، در مواردی که تقویت با نوفهٔ پایین و در بسامدهای بالا مورد نیاز است، به طور گسترده از *HEMT* استفاده می‌شود. عملکرد آن، با سرمایش ترانزیستور به دماهای پایین به طور قابل ملاحظه‌ای بهسازی می‌شود.

یک لیزر پیوندگاه *p-n*، رضایت بخش‌تر از آنچه در شکل ۶-۷ تشریح شد را می‌توان با استفاده از ساختار پیوندگاه ناهمگن سه لایه‌ای شکل ۶-۱۵ تولید کرد. پیوندگاه *p-n* بین $Ga_{1-x}\ Al_x\ As$ نوع *n* و *GaAs* نوع *p* شکل می‌گیرد. الکترونهای تزریق شده به ناحیهٔ *p*، به وسیلهٔ سد پتانسیل حاصل از لایه‌ای از $Ga_{1-x}\ Al_x\ As$ نوع *p*، در ناحیهٔ کوچکی در همسایگی پیوندگاه محبوس می‌شوند. این امر باعث می‌شود که وارونی تراکم ذرات و عمل لیزر به ازای جریانهای به مراتب کمتر از یک پیوندگاه سادهٔ *p-n*، حاصل می‌شود. مزیت دیگر ساختاری، که در شکل ۶-۱۵ نشان داده شده است، آن است که $Ga_{1-x}\ Al_x\ As$ ضریب شکست کمتری از *GaAs* دارد و در نتیجه بازتاب داخلی کلی کمکی است برای محبوس کردن فوتونها در لایهٔ



شکل ۶-۱۵ : لیزر با پیوندگاه ناهمگن سه لایه‌ای.

$GaAs$ که در آن عمل لیزر صورت می‌گیرد[1].

مسایل ۶

۶-۱ به فرض آنکه پتانسیل در تهی لایهٔ یک پیوندگاه p-n با معادلات (۶-۷) داده شودکه در آن w_n و w_p به وسیلهٔ معادلات (۶-۹) بیان می‌شوند. فاصله تا لبهٔ تهی لایه را (به صورت کسری از پهنای کل $w_n + w_p$)، که به ازای آن تراکمهای حامل اکثریت با ضریب ۲ کاهش می‌یابد، بر آورد کنید (فرض کنید $N_A = N_D$).

۶-۲ ظرفیت یک دیود پیوندگاه p-n از جنس سیلیسیم با القاییدگی $۱۰۰\mu H$، برای تولید یک مواد تشدید، به کار می‌رود. وقتی تغذیهٔ اعمال شده بر پیوندگاه از $۱V$ به $۱۰\ V$ تغییر کند، تغییر دربسامد تشدیدرامحاسبه‌کنید.(مقادیر $N_A = N_D = ۱۰^{۲۲} m^{-۳}$ و $T = ۳۰۰K$، $\varepsilon = ۱۲$، $n_i = ۲\times ۱۰^{۱۶} m^{-۳}$ را به کار برید و فرض کنید که مساحت پیوندگاه برابر $۱۰^{-۶}\ m^۲$ است.)

۶-۳ تغییرات پتانسیل $\phi(x)$ و پهنای تهی لایه را برای یک پیوندگاه p-n، که در آن میزان آلاییدگی به طور خطی با مکان تغییر می‌کند، یعنی $N_D - N_A = kx$، محاسبه کنید. باید فرض کنید که این تغییرات خطی در سرتاسر تهی لایه معتبر است.

۶-۴ از یک دیود پیوندگاه p-n، وقتی در دمای اتاق با $۰/۱۵V$ تغذیه معکوس شود، جریان $۵\mu A$ شارش می‌کند. اگر دیود با همان ولتاژ تغذیهٔ مستقیم شود، چه جریانی از آن شارش می‌کند؟

۶-۵ نشان دهید که روش زیر که روش دیگری برای به دست آوردن رابطهٔ جریان - ولتاژ برای پیوندگاه p-n است نیز به معادلهٔ (۶-۲۲) منجر می‌شود. سهم الکترونی در جریان را با به کارگیری معادلهٔ (۵-۷۴) محاسبه کنید و جریان پخشی الکترونهای تزریق شده در ناحیهٔ p به وسیلهٔ تغذیهٔ مستقیم را به دست آورید. به فرض آنکه **درون تهی‌لایه،** حتی در حالت غیر تعادل در حضور تغذیه، معادلات (۶-۱۰) معتبر باقی می‌مانند، تراکم الکترونهای اضافی در لبهٔ تهی‌لایه در طرف p را می‌توان به دست آورد.

از این روش استفاده کنید و گزاره‌های آمده در پانوشت صفحهٔ مربوط به مقدار I_{no} ی مناسب برای پیوندگاه پایه - گسیلندهٔ یک ترانزیستور p-n-p را توجیه کنید. باید معادلهٔ (۵-۷۴) را به مورد تزریق حامل اقلیت به نیمرسانایی با طولی به مراتب کمتر از طول نفوذ، تعمیم دهید. می‌توانید فرض کنید که تراکم حفره‌های اضافی در لبهٔ تهی‌لایه در پیوندگاه پایه - جمع‌کننده، صفر می‌شود.

۶-۶ از تعمیم معادلات (۶-۵) تا (۶-۹) به وضعیتی با تغذیهٔ معکوس متناهی استفاده کنید و

۱- برای کسب اطلاعات بیشتر در بارهٔ پیوندگاههای ناهمگن نیمرسانا کتاب زیر را ببینید:
M. Jaros, Physics and Application of Semiconductor Microstructures. Oxford Univesity Press, 1989.

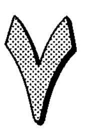
بیشینهٔ میدان الکتریکی درون تهی‌لایه را محاسبه کنید.

پهنای T ی سد پتانسیل را، که الکترونهای درگیر در فرایند شکست‌زنر باید در آن تونل برنند، برآورد کنید. به فرض آنکه احتمال تونل‌زنر عاملی به شکل $exp\,(-۲\alpha T)$ داشته باشد (چرا؟)، نشان دهید که رابطهٔ ولتاژ – جریان تونل‌زنی، برای $|V| \gg \Delta\phi_{\circ}$ ، شامل عاملی چون $exp\,(-b/\,|V|^{۱/۲}\,)$ است.

به فرض آنکه زمان بین برخوردهای حاملهای بار (با $m_e = ۰/۱m$) در تهی‌لایه برابر $۱۰^{-۱۲}s$ باشد، میدان الکتریکی بحرانی را برای شکست بهمنی برآورد کنید. از آنجا میزان آلاییدگی ($N_A = N_D$) لازم برای دستیابی به ولتاژ شکست برابر $۱۰۰V$ را در یک دیود سیلیسیم ($E_G = ۱/۱eV$ و $\varepsilon = ۱۲$) به دست آورید.

مکانیک کوانتومی کلید درک مغناطیس است. وقتی شخصی با استفاده از این کلید به اولین اتاق راه می‌یابد، اتاقهای غیر منتظرهٔ دیگری در ورای آن اتاق می‌یابد، ولی همواره آن کلید اصلی است که هر دری را می‌گشاید.

ج. اچ . وان ولک (در سخنرانی سال ۱۹۷۷ به مناسبت دریافت جایزه نوبل)



دیامغناطیس و پارامغناطیس

۷-۱ مقدمه

وقتی میدان مغناطیسی اعمال شده بر هر ماده از صفر رو به افزایش باشد، باعث پیدایش یک *emf* القایی در آن می‌شود (قانون فارادی)، که الکترونهای درون ماده را شتاب می‌دهد. بر اساس قانون لنز جریان الکتریکی حاصل در جهتی است که میدان اعمال شده را کاهش می‌دهد (استتار می‌کند). به دلایلی که در بخش ۷-۳ توضیح داده خواهند شد، وقتی میدان اعمال شده ثابت نگه داشته شود (با آنکه در آن صورت *emf* القایی صفر می‌شود)، این جریان الکتریکی باقی می‌ماند و از این رو ماده مغناطش $\mathbf{M}$ (گشتاور مغناطیسی به ازای واحد حجم) را در جهت خلاف میدان کسب می‌کند. این پدیده به **دیامغناطیس** معروف است . شدت اثرهای مغناطیسی مواد با **پذیرفتاری مغناطیسی** χ کمّی می‌شود. این کمیت به صورت ثابت بی بعد تناسب بین $\mathbf{M}$ و $\mathbf{H}$ تعریف می‌شود که در آن $\mathbf{H}$ میدان مغناطیسی ماکروسکوپی درون ماده است [(پیوست (ب) را ببینید)].

بنابراین

$$\mathbf{M} = \chi \ \mathbf{H} \qquad (۷-۱)$$

از بحث بالا نتیجه می‌گیریم که χ برای مواد دیامغناطیسی منفی است ؛ و معمولاً فوق العاده کوچک نیز هست. مقدار $-۸/۱ \times ۱۰^{-۶}$ برای یخ، مقدار نوعی این کمیت است. پذیرفتاری

مغناطیسی مواد دیا مغناطیسی، در دماهایی از مرتبهٔ دمای اتاق و کمتر از آن ، معمولاً فقط به طور ضعیف به دما بستگی دارد.

در مواردی که در آنها برخی از اتمها یا تمامی آنها گشتاور دو قطبی دائمی دارند (یعنی گشتاورِ دو قطبی که در غیاب میدان اعمال شده غیر صفر است) ، اثرهای دیا مغناطیسی معمولاً، در مقایسه با اثرهای **پارا مغناطیسی** وابسته به گشتاورهای دائمی، کوچک است. مغناطش مواد پارامغناطیسی در غیاب میدان اعمالی صفر است و در میدانهای کوچک معادلهٔ (۷-۱) را برآورده می‌کند. در بخش ۷-۲ نشان می‌دهیم که این رفتار را می‌توان، با فرض اینکه دو قطبیهای دائمی رفتاری مستقل از هم دارند، درک کرد. در میدان صفر، گشتاورهای دائمی سمتگیری کاتوره‌ای دارند و مغناطش ***خالص*** صفر می‌شود؛ در میدانهای کوچک، رقابتی بین اثر هم‌خط سازی میدان و بی نظمی گرمایی وجود دارد، ولی به طور متوسط تعداد گشتاورهای مؤلفه‌های موازی با میدان بیش از گشتاورهای مؤلفه‌های پاد موازی با میدان است. لذا پذیرفتاری مغناطیسی مثبت است و با افزایش دما، که در اثر آن بی‌نظمی گرمایی زیاد می‌شود، کاهش می‌یابد. مقدار نوعی χ برای یک جامد پارامغناطیسی مانند $CuSO_4$ در دمای اتاق، برابر $3/8 \times 10^{-4}$ است.

در دماهای پایین، دیگر نمی‌توان از برهم کنشهای بین گشتاورهای دو قطبی دائمی صرفنظر کرد. انرژی گرمایی آنقدر نیست که سبب شود دو قطبیها، در میدان اعمالی صفر، در جهت کاتوره‌ای قرار گیرند. جهت دوقطبیها طوری به هم وابسته می‌شود که انرژی بر هم کنش راکمینه می‌کند. از این رو دو قطبیهای دائمی در تمامی مواد پارامغناطیسی با کاهش دما گذاری به نوعی از حالت منظم، در میدان اعمالی صفر، انجام می‌دهند. دمای نظم‌یابی تغییرات زیادی دارد؛ این دما برای کبالت به بزرگی $1388K$ و برای برخی نمکهای یونی، که در آنها یونهای مغناطیسی فاصلهٔ زیادی از هم دارند، به کوچکی $1K$ است. نظم مغناطیسی موضوع فصل ۸ است.

در این کتاب فقط خواص مغناطیسی ناشی از الکترونهای موجود در جامدات را بررسی خواهیم کرد. اثرهای مغناطیسی ناشی از هسته‌ها عموماً، با عاملی از مرتبهٔ جرم الکترون تقسیم بر جرم پروتون (حدود ۱/۲۰۰۰)، ضعیف تراند. ولی خواننده نباید فرض کند که مغناطیس هسته‌ای کم اهمیت است. برای مثال شگرد تشدید مغناطیسی هسته‌ای *(NMR)* ابزاری عالی برای مطالعهٔ خواص جامدات به دست می‌دهد.

این مقدمه را با یک هشدار دربارهٔ مسایلی می‌بندیم که خواننده ممکن است به هنگام جستجو برای مقادیر پذیرفتاری مغناطیسی مندرج در جداول با آنها مواجه شود: پذیرفتاری تعریف شده در معادلهٔ (۷-۱) بی بعد است، اگر چه شاید به طور گمراه کننده اغلب تحت عنوان پذیرفتاری به ازای واحد حجم یا پذیرفتاری حجمی خوانده می‌شود. احتمالاً خواننده با

پذیرفتاری به ازای واحد جرم (یا پذیرفتاری جرمی) و پذیرفتاری به ازای یک مول (یا پذیرفتاری مولی) نیز سروکار خواهد داشت . این کمیت‌ها بر حسب پذیرفتاری بی بعدی، که تعریف کرده‌ایم، به ترتیب با χ/ρ و χV_m بیان می‌شوند، که در آنها ρ چگالی جرمی و V_m حجم مولی است؛ متأسفانه نماد χ به دفعات برای هر سهٔ این کمیت‌ها به کار برده می‌شود. مشکل دیگری که ممکن است خواننده با آن مواجه شود آن است که ، گرچه پذیرفتاری حجمی بی بعد است، ولی مقدار مناسب برای واحدهای SI به کار رفته در سرتاسر این کتاب به مقدار مناسب برای دستگاه cgs، که اغلب کماکان در جدولبندی مقادیر χ به کاربرده می‌شود، فرق دارد: رابطهٔ بین χها در دو دستگاه به قرار زیر است:

$$\chi_{SI} = ۴\pi \chi_{cgs} \qquad (۲-۷)$$

۲-۷ پارامغناطیس

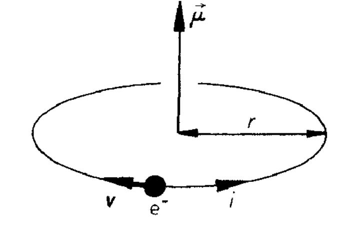
۱-۲-۷ منشاء گشتاورهای دو قطبی دائمی

برای بررسی گشتاورهای دو قطبی اتمی تصور کلاسیکی سادهٔ اتم، یعنی حرکت دورانی الکترون با سرعت v روی دایره‌ای به شعاع r حول هسته (شکل ۷-۱)، را در نظر می‌گیریم. دورهٔ τ ی مدار $۲\pi r/v$ است، و بنابراین الکترونی که در مدار حرکت می‌کند هم ارز جریان الکتریکی $i = (-e)/\tau = -ev/۲\pi r$ است : علامت منفی نشان می‌دهد که الکترون در خلاف جهت جریان حرکت می‌کند. این یکی از اصول الکترومغناطیس است (قانون آمپر) که چنین حلقهٔ جریانی دارای گشتاور دو قطبی مغناطیسی زیر است:

$$\vec{\mu} = i\,\mathbf{a} \qquad (۳-۷)$$

که در آن $\mathbf{a}$ بردار "سطح" حلقه و جهت آن به گونه‌ای است که جریان از دید شخصی که در راستای $\mathbf{a}$ بایستد، در جهت ساعتگرد است. از این رو

$$\vec{\mu} = -\frac{ev}{۲\pi r}\,\mathbf{a} = -\frac{e\hbar}{۲m}\,\mathbf{l} \qquad (۴-۷)$$



شکل ۷-۱ : الکترونی که یک مدار دایره‌ای را دور می‌زند هم ارز یک حلقهٔ جریان و در نتیجه هم ارز یک گشتاور مغناطیسی است.

که در آن $\hbar\mathbf{l}$ بردار اندازه حرکت زاویه‌ای الکترونی است که دور می‌زند ($|\hbar\mathbf{l}| = mvr$) و از $|\mathbf{a}| = \pi r^2$ استفاده کرده‌ایم. اندازه حرکت زاویه‌ای را به صورت $\hbar\mathbf{l}$ می‌نویسیم، زیرا $\hbar$ واحد طبیعی برای اندازه حرکت زاویه‌ای مداری است. بنابراین از معادلهٔ (۷-۴) نتیجه می‌شود که واحد طبیعی گشتاور مغناطیسی مگنتون‌بور μ_B است.

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9/27 \times 10^{-24} J\ T^{-1} \qquad (5\text{-}7)$$

معادلهٔ (۷-۴) نشان می‌دهد که اندازه حرکت زاویه‌ای مداری الکترونهای اتم سهمی در گشتاور مغناطیسی آن دارند. معادلهٔ (۷-۴) در بررسی مکانیک کوانتومی نیز برقرار است، به شرط آنکه $\hbar\mathbf{l}$ را به عنوان عملگر اندازه حرکت زاویه‌ای الکترون قلمداد کنیم.

یک گشتاور مغناطیسی نیز به اندازه حرکت زاویه‌ای ذاتی (اسپین) الکترون $\hbar\mathbf{s}$ مربوط می‌شود:

$$\vec{\mu} = -g_\circ\ \mu_B\ \mathbf{s} \qquad (6\text{-}7)$$

با تقریب بسیار خوبی (که مطلقاً برای منظور ما کفایت می‌کند) $g_\circ = 2$. مقایسهٔ معادلات (۷-۴) و (۷-۶) نشان می‌دهد که اثر اندازه حرکت زاویه‌ای اسپین، در تولید گشتاور مغناطیسی، دو برابر اثر اندازه حرکت زاویه‌ای مداری است. ویژه مقادیر مؤلفهٔ عملگر $\hbar\mathbf{s}$، یعنی $\hbar s_z$، عبارتند از $\pm\frac{1}{2}\hbar$، و در نتیجه، با استفاده از معادلهٔ (۷-۶)، مؤلفه z گشتاور مغناطیسی ذاتی می‌تواند مقادیر $\pm\mu_B$ را اختیار کند.

گشتاور دو قطبی مغناطیسی کل اتم از جمع زدن معادلات (۷-۴)و (۷-۶) روی تمام الکترونهای موجود در اتم به دست می‌آید. بنابراین

$$\vec{\mu} = -\mu_B\ (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \qquad (7\text{-}7)$$

که در آن $\hbar\mathbf{L} = \hbar\sum\mathbf{l}$ و $\hbar\mathbf{S} = \hbar\sum\mathbf{s}$ و جمع روی الکترونهای موجود در اتم زده می‌شود؛ $\hbar\mathbf{L}$ و $\hbar\mathbf{S}$ به ترتیب، اندازه حرکت زاویه‌ای مداری و اسپین کل اتم‌اند. سهم یک پوستهٔ بسته از الکترونها در $\mathbf{L}$ و $\mathbf{S}$ صفر است؛ به‌طوری که گشتاورهای دو قطبی دائمی تنها در اتمها یا یونهای با پوسته‌های ناکامل، از قبیل فلزات واسط و خاکیهای کمیاب، که به ترتیب، پوسته‌های ناکامل $3d$ و $4f$ دارند، پدیدار می‌شود؛ لذا فلزات واسط و یونهای خاکی کمیاب رفتار پارا مغناطیسی از خود بروز می‌دهند و از آنها، برای تشریح این پدیده، استفاده خواهیم کرد. در میدانهای اعمالی ضعیف، اندازه حرکتهای زاویه‌ای $\hbar\mathbf{L}$، $\hbar\mathbf{S}$ و $\hbar\mathbf{J}\ (=\hbar\mathbf{L} + \hbar\mathbf{S})$ مربوط به پوسته‌های ناکامل موجود در یونهای **منزوی** این عناصر به وسیلهٔ **طرح جفتیدگی راسل-ساندرز**، که گاهی به جفتیدگی $L\text{-}S$ موسوم است، تعیین می‌شوند. بر اساس این طرح حالتهای

مانای پوسته عبارتند از ویژه حالتهای $\mathbf{L}^2$، $\mathbf{S}^2$ و $\mathbf{J}^2$ با ویژهٔ مقادیر، به ترتیب، $L(L+1)$، $S(S+1)$ و $J(J+1)$.

مقادیر L، S و J برای حالت با پایین‌ترین انرژی به وسیلهٔ **قواعد هوند** داده می‌شود.

این قواعد به ترتیبی که باید رعایت شوند عبارتند از:

(۱) S مقدار بیشینهٔ مجاز، بر پایهٔ اصل طرد پائولی، را اختیار می‌کند- بیشترین تعداد ممکن الکترونها باید اسپینهای موازی داشته باشند.

(۲) L مقدار بیشینهٔ سازگار با این مقدار S را اختیار می‌کند- اندازه حرکتهای زاویه‌ای مداری الکترونها در حد امکان هم جهت‌اند.

(۳) برای پوسته‌ای کمتر از نصف پر $J = |L-S|$ و بیش از نصف پر $J = |L+S|$ است.

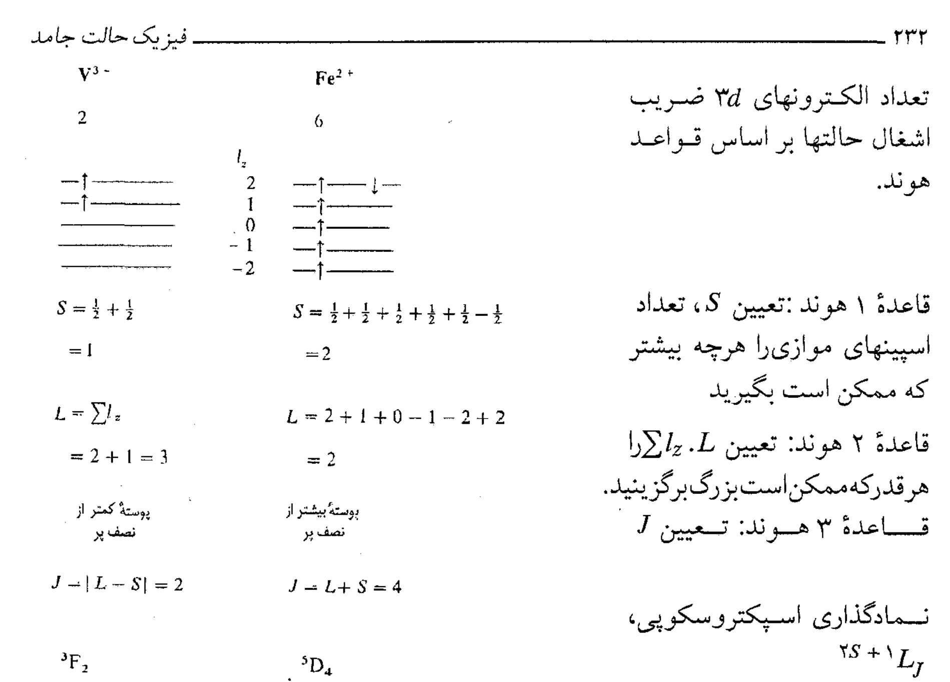
در شکل ۷-۲ کاربرد این قواعد را، برای محاسبهٔ L، S و J مربوط به حالتهای پایهٔ یونهای فلز واسط V^{3+} و Fe^{2+} نمایش داده‌ایم. از نمادگذاری اسپکتروسکوپی (شکل ۷-۲ را ببینید) در جدولهای ۷-۱ و ۷-۲ استفاده کرده‌ایم تا مقادیر حاصل از پیشگویی قواعد ۱ و ۲ ی هوند، را برای تمام یونهای خاکی کمیاب و فلز ناپایدار نشان دهیم. توجه کنید که قواعد ۱ و ۲ ی هوند، که مقادیر L و S را تعیین می‌کنند، به نیروهای کولنی بین الکترونها مربوط می‌شوند؛ چون این نیروها به مراتب از نیروهای مغناطیسی بزرگتراند[1]، اعمال میدان مغناطیسی، تداخلی با اینها ندارد. قاعدهٔ سوم هوند، که مقدار J را مشخص می‌کند، به بر هم کنش اسپین- مدار، یعنی به میدان مغناطیسی تولید شده به وسیلهٔ حرکت الکترونهای موجود در اتم، مربوط می‌شود؛ این میدان از مرتبهٔ $10\,T$ است (مسئلهٔ ۷-۱ را ببینید) و لذا این امکان وجود دارد که این قاعده، با اعمال میدانی از همین مرتبه، نقض شود. همچنین توجه کنید که شکافتگی ترازهای متناظر با مقادیر مختلف J می‌تواند، در دمای اتاق، با $k_B T$ قابل مقایسه باشد و در نتیجه ترازهایی جز تراز حالت پایه نیز ممکن است در تعادل گرمایی اشغال شده باشند. قاعدهٔ سوم هوند نیز ممکن است در جامدات، به دلیل اثر میدان ***الکتریکی*** یونهای همسایه نقض شود.

۷-۲-۲ برهم‌کنش گشتاور در دو قطبی دائمی با میدان مغناطیسی اعمالی

میدان مغناطیسی $\mathbf{B}$، به طور قراردادی در راستای محور z اختیار می‌شود. هم سویی دو قطبی اتمی بااین میدان به دلیل وجود جملهٔ زیر در انرژی الکترونهای اتمی رخ می‌دهد.

$$H_P = \vec{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_z B \qquad (۸-۷)$$

[1] - فصل ۸ را برای توجیه این گزاره و اولین قاعدهٔ هوند ملاحظه کنید.



شکل ۷-۲: کاربرد قواعد هوند برای محاسبهٔ اعداد کوانتومی S، L و J حالتهای پایهٔ یونهای V^{3+} و Fe^{2+}. پوستهٔ $3d$ دارای $l = 2$ است و در نتیجه $2l + 1$ زیر تراز متناظر با $l_z = -2, -1, 0, 1, 2$ وجود دارد. در نمادگذاری اسپکتروسکوپی، مقادیر L برابر ۰، ۱، ۲، ۴، ۵، ۶، ... با حروف S، P، D، F، G، H، I،. . .نمایش داده می‌شوند.

که در آن $\vec{\mu}$ گشتاور دو قطبی است که با معادله (۷-۷) بیان می‌شود. اگر چه H_p باعث سمتگیری مجدد گشتاور مغناطیسی به وسیلهٔ میدان مغناطیسی می‌شود، ولی این درست نیست که آن را به عنوان انرژی پتانسیل بر هم کنش "آهن ربای میله‌ای اتمی" با میدان تفسیر کنیم برای مثال در پیوست ج نشان خواهیم داد که جملهٔ $\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}\ \mu_B$ در H_p بخشی از انرژی جنبشی الکترونها در میدان مغناطیسی است. به خواننده توصیه می‌شود، برای بحث فراتر پیرامون انرژیهای مغناطیسی به کتاب مندل (۲) مراجعه کند.

ساده‌ترین رهیافت برای محاسبهٔ اثر انرژی همسویی H_p آن است که فرض کنیم این انرژی کوچک است و از نظریهٔ اختلال مرتبهٔ اول استفاده کنیم. این شامل محاسبهٔ مقدار چشم داشتی برای حالت پایهٔ ***مختل نشدهٔ*** یون، براساس قواعد هوند است. این محاسبه مستلزم دانشی است در مکانیک کوانتومی ورای آنچه که دراین کتاب پذیرفته‌ایم، در نتیجه در اینجا آن را تکرار نخواهیم کرد و نظر خوانندهٔ علاقمند را به پیوست P ی کتاب اشکرافت و مرمین(۱۱) جلب می‌کنیم (برای دستیابی به یک محاسبهٔ ساده‌تر هندسی، که همان نتیجه را می‌دهد، مسئلهٔ ۷-۳

را ببینید) نتیجهٔ این محاسبهٔ تفسیری ساده در بر دارد که اینک عرضه می‌شود؛ اثر انرژی همسویی (۷–۸) آن است که تبهگنی حالت پایهٔ یون مربوط به ۱ + $2J$ مقدار مختلف از J_z را از بین می‌برد. انرژی این حالتها عبارتند از

$$E_p = < H_p > = g\mu_B \ J_z \ B \qquad (۹-۷)$$

که در آن $J_z = -J, \dots, -۱, ۰, ۱, \dots, J$ و **عامل g ی لانده** به قرار زیر است:

$$g = \frac{۳}{۲} - \frac{L(L+۱) - S(S+۱)}{۲J(J+۱)} \qquad (۱۰-۷)$$

معادلهٔ (۷–۹) متناظر با ۱ + $2J$ تراز هم فاصله است و مقایسه معادلات (۷–۸) و (۷–۹) نشان می‌دهد که یون چنان رفتار می‌کند که گویی دارای گشتاور مغناطیسی **مؤثر** زیر است:

$$\vec{\mu}_{eff} = -g\mu_B \ \mathbf{J} \qquad (۱۱-۷)$$

عامل g ی لانده تعداد مگنتونهای بور مربوط به این گشتاور مؤثر را می‌دهد و در مدل هندسی سادهٔ مسئلهٔ ۷–۳ به این دلیل ظاهر می‌شود که $\vec{\mu}(\propto (\mathbf{L} + ۲\mathbf{S}))$ موازی $\vec{\mu}_{eff} \ (\propto \mathbf{J}(= \mathbf{L} + \mathbf{S}))$ نیست. شکل ۷–۳ ترازهای انرژی پیشگویی شده به وسیلهٔ معادلهٔ (۷–۹) را برای یونهای $V^{۳+}$, $Fe^{۲+}$ در میدان B نشان می‌دهد. پایین‌ترین انرژی متناظر با بیشینهٔ همسویی ممکن $\vec{\mu}_{eff}$ با $\mathbf{B}$ $(J_z = -J)$ است.

۷–۲–۳ محاسبهٔ مغناطش یونهای پارامغناطیس

اگر دو قطبیهای دائمی در یک جامد رفتاری مستقل از هم داشته باشند، در آن صورت اشغال نسبی ترازهای انرژی معادلهٔ (۷–۹)، در دمای T، با عامل بولتزمن بیان می‌شود

$$exp(-E_p/k_B \ T) = exp(+\vec{\mu}_{eff} \cdot \mathbf{B}/k_B \ T) = exp(-g\mu_B BJ_z/k_B \ T)$$

با استفاده از معادله (۷–۱۱)، سهم یک اتم در مؤلفهٔ z مغناطش $-g\mu_B \ J_z$ است. بنابراین مغناطش خالص برای N گشتاور در واحد حجم به صورت زیر بیان می‌شود:

$$M = N \sum_{J_z=-J}^{+J} -g\mu_B \ J_z \, exp(-g\mu_B BJ_z/k_B \ T) \Big/ \sum_{J_z=-J}^{+J} exp(-g\mu_B \ BJ_z/k_B \ T)$$

این کمیت را می‌توان به همان شیوه‌ای محاسبه کرد که در بخش ۲–۶–۱ انرژی گرمایی یک نوسانگر هماهنگ ساده را محاسبه کردیم. برای این کار توجه می‌کنیم که M را می‌توانیم به

شکل ۷-۳ : شکافتگی تبهگن حالت پایهٔ یونهای V^{+3} و Fe^{2+} به وسیلهٔ مـیدان مغناطیسی B ، که با معادله (۷-۹) بیان می‌شود.

صورت زیر بنوسیم:

$$M = -\frac{Nk_B\ T^{2}}{B}\frac{1}{Z}\left(\frac{\partial Z}{\partial T}\right)_B = -\frac{Nk_B\ T^{2}}{B}\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right)_B \qquad (۱۲-۷)$$

که در آن

$$Z = \sum_{J_z = -J}^{+J} exp\ (-g\mu_B BJ_z / k_B T) \qquad (۱۳-۷)$$

تابع پارش دو قطبی است. با توجه به اینکه Z یک سری هندسی با $2J+1$ جمله است که اولین جملهٔ آن $exp\,(g\mu_B\ BJ/k_B\ T)$ و نسبت دو جملهٔ پـیاپی آن $exp\,(-g\mu_B\ B/k_B\ T)$ است، می‌توان آن را به سادگی محاسبه کرد. بنابراین

$$Z = \frac{e^{x}\ \left(1-e^{-(2J+1)x/J}\right)}{1-e^{-x/J}} = \sinh\left[\left(\frac{2J+1}{2J}\right)\ x\right]\ /\ \sinh\left(\frac{x}{2J}\right) \qquad (۱۴-۷)$$

که در آن $x = g\mu_B\ BJ/k_B\ T$ اساساً مقیاس بدون بعدی برای میدان مغناطیسی است.

به این ترتیب، با به کار بردن معادلهٔ (۷-۱۴) در معادلهٔ (۷-۱۲) و پس از اندکی محاسبات [1]، داریم

$$M = -\frac{Nk_B T^2}{B} \left(\frac{d \ln Z}{dx}\right) \left(\frac{\partial x}{\partial T}\right)_B = Ng\mu_B J B_J(x) \qquad (۷\text{-}۱۵)$$

که در آن

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left[\left(\frac{2J+1}{2J}\right)x\right] - \frac{1}{2J}\coth\left(\frac{x}{2J}\right) \qquad (۷\text{-}۱۶)$$

به تابع بریلوئن موسوم است. رفتار کیفی این تابع برای تمام مقادیر J مشابه است. این تابع برای مقادیر کوچک x، به طور خطی با x افزایش می‌یابد ولی، برای xهای بزرگ، به مقدار اشباعی می‌رسد؛ در نتیجه، مغناطش، در میدانهای ضعیف، به طور خطی با میدان افزایش می‌یابد و، برای میدان بزرگ، به **مغناطش اشباعی** $N\mu_B gJ$ میل می‌کند که متناظر است با بیشینهٔ همسویی ممکن دو قطبیها با میدان (قرار گرفتن تمام یونها در حالت با $J_z = -J$). تغییر رفتار وقتی روی می‌دهد که $x \sim J$، یعنی وقتی $g\mu_B B/k_B T \sim 1$ باشد. برای $g = 1$، این مقدار متناظر است با میدانی از مرتبهٔ $450T$ در دمای $T = 300K$ و در نتیجه با میدانی از مرتبهٔ $1/5T$ در دمای $T = 1K$. شکل ۷-۴ نشان می‌دهد که وابستگی تجربی مشاهده شدهٔ مغناطش به B و T برای یونهای Ga^{3+}، Fe^{3+} و Cr^{3+} به خوبی به وسیلهٔ تابع بریلوئن توصیف می‌شود.

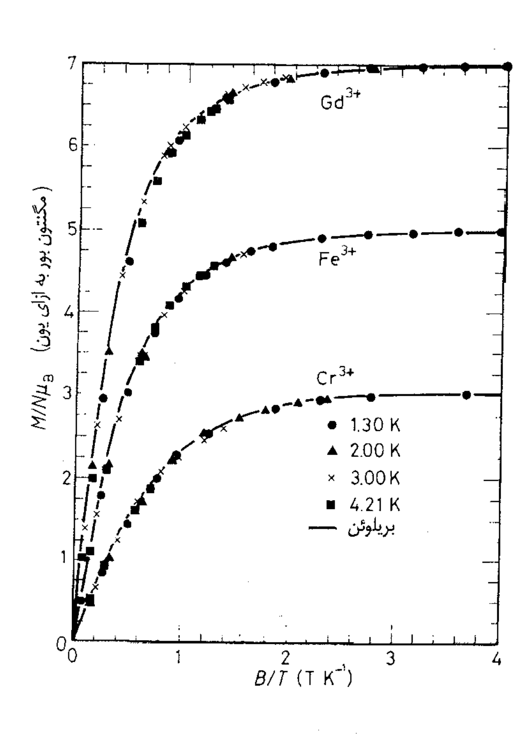
برای مقادیر کوچک x، داریم $B_J(x) \approx (J+1)x/3J$ و در نتیجه در میدانهای ضعیف

$$M = Ng^2\mu_B^2 J(J+1)B/(3k_B T) \qquad (۷\text{-}۱۷)$$

قبل از به کارگیری این نتیجه در به دست آوردن مقداری برای پذیرفتاری χ، باید به یادآوریم که B در معادلهٔ (۷-۸) و معادلاتی که در پی آن آمده‌اند، میدان مغناطیسی **موضعی** در جایگاه یون است، که در حالت کلی با میدان اعمالی، به دلیل سهم ناشی از گشتاورهای مغناطیسی یونهای همسایه، تفاوت دارد. برای مقادیر کوچک χ، داریم $\mu_0 M \ll B$ و اختلاف بین میدانهای موضعی و اعمال شده و نیز اختلاف بین B و $\mu_0 H$ از اهمیت برخوردار نیست. در آن صورت، با استفاده از معادلات (۷-۱۷) و (۷-۱) داریم

$$\chi = \frac{M}{H} = \mu_0 \frac{M}{B} = \frac{Np^2\mu_B^2 \mu_0}{3 k_B T} \qquad (۷\text{-}۱۸)$$

۱- به خواننده‌ای که نخواهد یا نتواند این محاسبات را انجام دهد توصیه می‌شود مسئلهٔ ۴-۴ را حل کند، که شامل همان محاسبه در موردی به مراتب ساده‌تر (در عین حال بسیار مهم) با $J=S=\frac{1}{2}$ و $g=2$ است.



شکل ۷-۴: منحنیهای مغناطش مربوط به یونهای Cr^{+3} موجود در زاج کرومیوم پتاسیم، یونهای Fe^{+3} موجود در زاج آمونیوم آهن و یونهای Gd^{+3} موجود در اکتاهیدرات سولفات گادولنیوم. توجه کنید مقادیر $M/N\mu_B$ ، در دماهای مختلف، بریک منحنی قرار می‌گیرند. این نشانگر آن است که مغناطش تابعی است از B/T که با معادلهٔ (۷-۱۵) سازگار است. منحنی‌های توپر از معادلهٔ (۷-۱۵)، با به کاربردن $g=۲$ و $J=\frac{۳}{۲}$ برای $Cr^{۳+}$، $J=\frac{۵}{۲}$ برای $Fe^{۳+}$ و $J=\frac{۷}{۲}$ برای $Gd^{۳+}$ به دست می‌آیند. مقایسه با جدولهای ۷-۱ و ۷-۲ سازگاری این مقادیر با پیشگوییهای قواعد هوند برای $Fe^{۳+}$ و $Gd^{۳+}$ عدم سازگاری برای $Cr^{+۳}$ را نشان می‌دهد. مقادیر لازم برای حصول سازگاری در مورد $Cr^{۳+}$ نشان می‌دهد که اندازه حرکت زاویه‌ای مداری به وسیلهٔ میدان بلور فرونشانده می‌شود و در نتیجه $L\approx ۰$ و $J\approx S$. این نتایج با مجوز از مرجع زیر اخذ شده‌اند:

W.E. Henry, Phys. Rev, **88**, *559 (1952)*

که در آن $p=g\,[J\,(J+۱)]^{\frac{۱}{۲}}$ است. از این نمادگذاری به این دلیل استفاده شده است که معادلهٔ (۷-۱۸) نتیجهٔ محاسبهٔ کلاسیکی‌ای است که لانژون برای پذیرفتاری پارامغناطیس یونهای با گشتاور مغناطیسی $p\mu_B$ انجام داده است (در مورد محاسبهٔ لانژون برای دو قطبیهای الکتریکی، بخش ۹-۱-۳ را ببینید). محاسبهٔ کوانتومی مورد مطالعه، مقدار p را به خواص یون مربوط می‌سازد. معادلهٔ (۷-۱۸) **قانون کوری** برای یک پارامغناطیس را این طور توضیح می‌دهد که پذیرفتاری به طور معکوس با دمای مطلق متناسب است؛ اگر این قانون را به صورت $\chi=C/T$ بنویسیم، آنگاه **ثابت کوری**، C ، به قرار زیر خواهد بود:

$$C=\frac{Np^{۲}\mu_B^{۲}\mu_{۰}}{۳k_B} \qquad (۷\text{-}۱۹)$$

درج ارقام نوعی در معادلهٔ (۷-۱۸) ($N\approx ۱۰^{۲۸}\,m^{-۳}$ و $p^{۲}=۳$) نشان می‌دهد که χ در دمایی

حدود K ۱/۰ ، از مرتبهٔ واحد می‌شود؛ از این رو تمایز بین میدان اعمال شده و میدان موضعی و تمایز بین B و $\mu_0 H$ تنها در دماهای زیر حدود $1K$ قابل ملاحظه می‌شود. در پیوست (ب) پیرامون رابطهٔ بین میدانهای موضعی و اعمال شده به هنگامی که نتوان از اختلاف آنها چشم پوشید، بحث می‌کنیم؛ این رابطه به شکل نمونه و تقارن موجود در ترتیب اتمی بستگی دارد. در پیوست (ب) نشان خواهیم داد که در مورد نمونه‌ای با تقارن کروی، که در آن هریون یا محیطی با تقارن مکعبی دارد یا به وسیلهٔ دو قطبیهایی که به طور کاتوره‌ای قرار گرفته‌اند احاطه شده است (نظیر در یک مایع یا گاز) سهم سایر دو قطبیها در میدان موضعی صفر است؛ برای این حالت میدانهای موضعی و اعمال شده یکی هستند.

با به کارگیری معادلهٔ (۷-۱۸) می‌توان مقادیری برای p^2 ، با استفاده از مقادیر اندازه‌گیری شدهٔ χ ، به دست آورد. در جدولهای ۷-۱ و ۷-۲ ، مقادیر حاصل از این شیوه با مقادیر نظری حاصل از به کارگیری قواعد هوند، برای یونهای منزوی، مقایسه شده‌اند. سازگاری عموماً، در مورد یونهای خاکی کمیاب خوب است، ولی از جدول ۷-۲ دیده می‌شود که برای اکثر فلزات واسط، با استفاده از S به جای J در محاسبهٔ مقدار p در معادلهٔ (۷-۱۸)، به سازگاری بهتری می‌توان دست یافت. بنابراین به نظر می‌رسد که یونهای فلز واسط به گونه‌ای رفتار می‌کنند که گویی برای آنها $L = 0$ است؛ گفته می‌شود که اندازه حرکت زاویه‌ای مداری آنها **فرونشانده** شده است . از مقدار مغناطش اشباعی یون Cr^{3+} در شکل ۷-۴ نیز پدیدهٔ فرونشاندن آشکار است. فرونشاندن به این دلیل پیش می‌آید که توابع موج الکترونها در جامد تحت تأثیر میدان الکتریکی حاصل از یونهای همسایه واقع می‌شوند؛ به این میدان الکتریکی **میدان بلور** گفته می‌شود. میدان بلور معمولاً آن قدر نیست که بر دو قاعدهٔ اول هوند اثر کند و لذا L و S اعداد کوانتومی خوب هریون باقی می‌مانند. ولی این میدان با بر هم‌کنش اسپین - مدار، که مسئول قاعدهٔ سوم هوند است، در رقابت است. این قاعده مشخص می‌کند کدام ترکیب خطی از $(2S+1)(2L+1)$ زیر حالت در چندتایی S و L حالتهایی با پایین‌ترین انرژی را تشکیل می‌دهد.

اگر اثر میدان بلور غالب باشد، همان گونه که معمولاً در مورد یونهای فلز واسط است، در آن صورت تقارن محیط اطراف، اغلب به گونه‌ای است که ویژه حالتهای تعیین شده به وسیلهٔ میدان بلوردارای $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = \langle L_z \rangle = 0$ هستندولذاسهم حرکت‌مداری‌درگشتاور مغناطیسی صفر می‌شود؛ در این‌صورت فقط $\mathbf{S}$ آزاد است که در مقابل میدان مغناطیسی اعمالی واکنش نشان می‌دهد. از طرف دیگر، قاعده سوم هوند در مورد یونهای خاکی کمیاب کارا است، زیرا پوستهٔ ناکامل $4f$ به مراتب به هسته نزدیکتر است و چندان تحت تأثیر میدان بلور قرار نمی‌گیرد. در این راستا، مهم است دریابیم به دلیل اینکه چگالی الکترون نسبت به هسته توزیع متقارن دارد، این

جدول ۷-۱ : مقادیر p به دست آمده، با استفاده از معادلهٔ (۷-۱۸)، حاصل از مقادیر اندازه‌گیری شدهٔ ثابت کوری یونهای خاکی کمیاب در مقایسه با مقدار $g[J(J+1)]^{1/2}$ برای حالت پایهٔ یون براساس قاعدهٔ هوند. تفاوت بین نظریه و تجربه در مورد Sm و Eu را می‌توان، با توجه به حضور ترازهای با مقادیر مختلف J در گسترهٔ $k_B T$ در اطراف حالت پایه توجیه کرد.

یون	تعداد الکترونهای $4f$	حالت پایهٔ قاعده هوند	مقدار اندازه‌گیری شدهٔ p	مقدار محاسبه شدهٔ p
La^{3+}	۰	$^1S_0$	۰	۰
Ce^{3+}	۱	$^2F_{5/2}$	۲/۴	۰/۵۴
Pr^{3+}	۲	$^3H_4$	۳/۵	۳/۵۸
Nd^{3+}	۳	$^4I_{9/2}$	۳/۵	۳/۶۲
Pm^{3+}	۴	$^5I_4$	—	۲/۶۸
Sm^{3+}	۵	$^6H_{5/2}$	۱/۵	۰/۸۴
Eu^{3}	۶	$^7F_0$	۳/۴	۰/۰۰
Gd^{3+}	۷	$^8S_{7/2}$	۸/۰	۷/۹۴
Tb^{3}	۸	$^7F_6$	۹/۵	۹/۷۲
Dy^{3+}	۹	$^6H_{15/2}$	۱۰/۶	۱۰/۶۳
Ho^{3+}	۱۰	$^5I_8$	۱۰/۴	۱۰/۶۰
Er^{3+}	۱۱	$^4I_{15/2}$	۹/۵	۹/۵۹
Tm^{3+}	۱۲	$^3H_6$	۷/۳	۷/۵۷
Yb^{3+}	۱۳	$^2F_{7/2}$	۴/۵	۴/۵۴
Lu^{3+}	۱۴	$^1S_0$	۰	۰

مقادیر تجربی از مرجع زیر اقتباس شده‌اند:
R. Kubo and T. Nagamiya, Solid State Physics, McGraw-Hill, New York, 2nd edn (1968), p. 451.

جدول ۷-۲ : مقایسه مقادیر تجربی و نظری p برای یونهای فلز واسط. مقادیر تجربی با $2[S(S+1)]$ سازگاری به مراتب بهتری دارند تا با $g[J(J+1)]$ که این حکایت از فرونشاندن اندازه حرکت زاویه‌ای مداری دارد.

یون	تعدادالکترونهای $3d$	حالت پایهٔ قاعدهٔ هوند	مقدار اندازه‌گیری شدهٔ p	$g[J(J+1)]$	$2[S(S+1)]$
K^{+}	۰	$^1S_0$	۰	۰	۰
V^{4+}	۱	$^2D_{3/2}$	۱/۸	۱/۵۵	۱/۷۳
V^{3+}	۲	$^3F_2$	۲/۸	۱/۶۳	۲/۸۳
V^{2+}	۳	$^4F_{3/2}$	۳/۸	۰/۷۷	۳/۸۷
Cr^{3+}	۳	$^4F_{3/2}$	۳/۷	۰/۷۷	۳/۸۷
Mn^{4+}	۳	$^4F_{3/2}$	۴/۰	۰/۷۷	۳/۸۷
Cr^{2+}	۴	$^5D_0$	۴/۸	۰	۴/۹۰
Mn^{3+}	۴	$^5D_0$	۵/۰	۰	۴/۹۰
Mn^{2+}	۵	$^6S_{5/2}$	۵/۹	۵/۹۲	۵/۹۲
Fe^{3+}	۵	$^6S_{5/2}$	۵/۹	۵/۹۲	۵/۹۲
Fe^{2+}	۶	$^5D_4$	۵/۴	۶/۷۰	۴/۹۰
Co^{2}	۷	$^4F_{9/2}$	۴/۸	۶/۵۴	۳/۸۷
Ni^{2+}	۸	$^3F_4$	۳/۲	۵/۵۹	۲/۸۳
Cu^{2+}	۹	$^2D_{5/2}$	۱/۹	۳/۵۵	۱/۷۳

مقادیر تجربی از مرجع زیر اقتباس شده‌اند:
R. Kubo and T. Nagamiya, Solid State Physics, McGraw-Hill, New York, 2nd edn (1968), p. 453.

شیب میدان الکتریکی است که مسئول اثر بر تابع موج است نه خود میدان؛ تغییر در میدان در سرتاسر تابع موج ۳d به مراتب بزرگتر از این تغییر در سرتاسر تابع موج ۴f است.

۷-۲-۴ پارامغناطیس الکترون رسانش

نظریهٔ بخش ۷-۲-۳ در وضعیتی که در آن گشتاورهای دائمی درون جامد مربوط به اسپین الکترونهای رسانش در یک فلز باشند، به کار نمی‌رود. این امر به این دلیل است که رفتار الکترونهای رسانش تحت استیلای تمایز ناپذیری آنها و در نتیجه تحت استیلای اصل پائولی قرار دارد؛ یونهای پارامغناطیس را می‌توانستیم به عنوان ذراتی تمایز پذیر، که از توزیع کلاسیکی بولتزمن تبعیت می‌کنند در نظر بگیریم، زیرا آنها در مکانهای معینی درون بلور جای داشتند. اصل پائولی حالتهایی را که یک الکترون رسانش می‌تواند اشغال کند، محدود می‌کند و مانع همسویی اسپین می‌شود و به این وسیله موجب کاهش پذیرفتاری به مقدار کمتر از مقدار قانون کوری می‌شود.

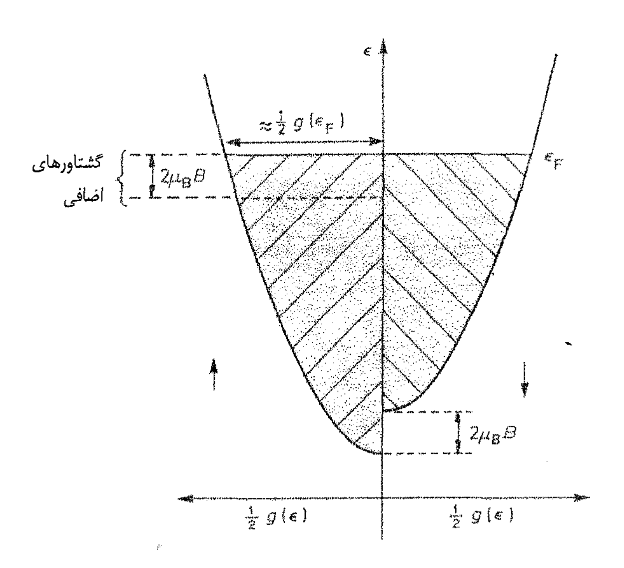
این اثر را می‌توان با مراجعه به شکل ۷-۵ محاسبه کرد، این شکل نشان می‌دهد منحنی چگالی حالتهای الکترون رسانش [شکل ۳-۲(ب) را ببینید] به دو نیمهٔ تفکیک می‌شود، یکی به ازای هریک از دو حالت اسپین الکترونها. مؤلفهٔ گشتاور مغناطیسی اسپین می‌تواند مقادیر $\pm\mu_B$ موازی با میدان اعمال شده را اختیار کند. انرژی الکترونهای با گشتاور مغناطیسی موازی با میدان B (که با ↑ نمایش داده می‌شود) به میزان $\mu_B B$ کم می‌شود و انرژی الکترونهای با گشتاورهای پادموازی با میدان B (که با ↓ نمایش داده می‌شوند) به قدر $\mu_B B$ زیاد می‌شود، که این امر منحنی چگالی حالتها را به صورتی که نمایش داده شده است، به دست می‌دهد. در تعادل گرمایی، انرژی فرمی ε_F باید برای هردو حالت اسپین یکی باشد. در مورد میدانهایی که می‌توانند در آزمایشگاه به‌کار روند جابه جایی $\mu_B B$ در ترازهای انرژی معمولاً به مراتب کوچکتر از انرژی فرمی ε_F است (مسئله ۷-۵ را ببینید) و اگر چنین باشد تعداد گشتاورهای موازی به قدر Δn، که تقریباً برابر مساحت مستطیلی است که در شکل ۷-۵ نشان داده شده، بر گشتاورهای پاد موازی فزونی خواهد یافت. از این رو داریم

$$\Delta n = \frac{۱}{۲}\, g(\varepsilon_F) \times ۲\mu_B\, B \qquad (۷\text{-}۲۰)$$

و از آنجا مغناطش عبارت است از

$$M = \mu_B\, \Delta n = \mu_B^۲\, g(\varepsilon_F)\, B \qquad (۷\text{-}۲۱)$$

که در آن $g(\varepsilon_F)$ چگالی حالتهای در سطح فرمی به ازای واحد حجم فلز است. با فرض آنکه اثرهای مغناطیسی ضعیف باشند و $B = \mu_۰ H$ اختیار شود، مقدار پذیرفتاری مغناطیسی را به



شکل ۷-۵: حالتهای اشغال شده برای الکترونهای رسانش واقع در میدان مغناطیسی در دمای $T = ۰$، که فزونی الکترونهای با گشتاورهای دو قطبی موازی با میدان (↑) را نسبت به گشتاورهای پاد موازی با میدان (↓) نشان می‌دهد. توجه کنید که اندازه حرکت زاویه‌ای اسپینی در جهت خلاف گشتاور دو قطبی است.

دست می‌آوریم

$$\chi_p = \frac{M}{H} = \mu_\circ \mu_B^2 \; g(\varepsilon_F) \qquad (۲۲-۷)$$

اثری که هم اکنون بررسی کردیم به **پارامغناطیس اسپینی پائولی** برای الکترون رسانش شهرت دارد. اگر تعدادالکترونهای آزاددرواحدحجم N باشد، می‌توانیم بنویسیم $g(\varepsilon_F) = ۳N / ۲\varepsilon_F$ [معادلهٔ(۳-۸)] و معادلهٔ (۷-۲۲) چنین می‌شود

$$\chi_p = \frac{۳N\mu_\circ \mu_B^2}{۲\varepsilon_F} \qquad (۲۳-۷)$$

مقایسهٔ این نتیجه با پیشگویی قانون کلاسیکی کوری $\chi = N\mu_\circ \mu_B^2 / k_B T$ حاصل از قرار دادن $J = S = \frac{۱}{۲}$ و $g = ۲$ در معادلهٔ (۷-۱۸) جالب توجه است. از آنجا که $\varepsilon_F = k_B T_F$، دیده می‌شود که پذیرفتاری اسپینی یک گاز تبهگن فرمی، مثل ظرفیت گرمایی (بخش ۳-۲-۳)، با عاملی از مرتبهٔ T / T_F به زیر مقدار کلاسیکی آن کاهش می‌یابد. به این مقدار کلاسیکی فقط در دماهای $T \gg T_F$ می‌توان رسید، که در آن دماها، الکترونها تبهگن می‌شوند؛ تمامی فلزات قبل از رسیدن به چنین دمای بالایی تبخیر می‌شوند!

با توجه به آنکه پذیرفتاری پارامغناطیسی پائولی، با چنین عامل بزرگی از مقدار کلاسیک

خود کمتر می‌شود، با پذیرفتاری دیامغناطیسی الکترونهای رسانش قابل مقایسه می‌شود. در واقع لانداثو مقدار زیر را برای پذیرفتاری دیا مغناطیسی یک فلز ***الکترون آزاد*** محاسبه کرد:

$$\chi_L = -\frac{۱}{۳}\ \chi_P \qquad \textbf{(۲۴-۷)}$$

بنابراین پذیرفتاری خالص برای الکترونهای ***آزاد*** مثبت و برابر $\frac{۲}{۳}\chi_P$ است. اثرهای ساختاری نواری بر هم کنشهای الکترون - الکترون این نتیجه را تعدیل می‌کنند، ولی مرتبهٔ بزرگی آن تغییر نمی‌کند. مقایسهٔ بین مقادیر نظری و تجربی χ_P برای فلزهای قلیایی در جدول ۷-۳ داده شده‌اند؛ سازگاری با عاملی از مرتبهٔ ۲ وجود دارد. در عمل پیشگوییِ χ مستقل از دما به خوبی برای بسیاری از فلزات، در گستره‌ای وسیع از دما برآورده می‌شود.

پذیرفتاری مغناطیسی برخی از فلزات واسط بزرگتر است و این به خاطر سهم الکترونهای $۳d$ است. اگر بپذیریم که الکترونها در یک نوار انرژی مربوط به همپوشانی توابع موج $۳d$ ی اتمهای همسایه قرار دارند، در آن صورت افزایش پذیرفتاری را می‌توان به سهم نوار $۳d$ در $g(\varepsilon_F)$ در معادلهٔ (۷-۲۲) نسبت داد؛ همپوشانی توابع موج $۳d$ کم است و این به آن معناست که نوار باریک است و چگالی حالتهای بالایی دارد. برای اینکه نوار $۳d$ در $g(\varepsilon_F)$ سهیم باشد، لازم است که فقط بخشی از آن پر باشد به طوری که انرژی فرمی درون آن قرار گیرد. در فلزات خاکی کمیاب الکترونهای $۴f$ در پذیرفتاری سهیم‌اند؛ در این مورد همپوشانی توابع موج اتمهای همسایه به طور قابل اغماض کم است و این سهم با این فرض محاسبه می‌شود که این الکترونها در حالتهای اتمی جایگزیده‌اند و پذیرفتاری آنها با معادلهٔ (۷-۱۸) بیان می‌شود. دمایی، که زیر آن بسیاری از فلزات واسط و فلزات خاکی کمیاب نظم مغناطیسی از خود بروز می‌دهند، بالاست و این نشانگر آن است که گشتاورهای مغناطیسی، در این فلزات، قویاً بر هم کنش می‌کنند.

۷-۳ دیا مغناطیس

پیش از این توضیح دادیم که چگونه دیامغناطیس به دلیل جریانهای القایی حاصل از اعمال میدان مغناطیسی بروز می‌کند؛ این جریانها تمایل دارند میدان اعمال شده را در درون ماده استتار کنند. بنابر مکانیک کلاسیکی این جریانها در اثر بر هم کنشهایی که تعادل گرمایی را درون ماده برقرار می‌کنند، تخریب می‌شوند (ازبین می‌روند). ولی، خواهیم دید که مکانیک کوانتومی پایداری خاصی به این جریانهای استتار کننده می‌دهد که نتیجه‌اش تمایل (معمولاً بسیار ضعیف) تمامی ماده به بیرون راندن میدانهای اعمال شده است. برای درک این پدیده باید آنچه که هنگام شتاب گرفتن ذره‌ای باردار به وسیلهٔ میدان مغناطیسی متغیر روی می‌دهد، را به طور مشروحتر بررسی کنیم.

جدول ۷-۳: مقایسهٔ پیشگویی نظریه الکترون آزاد[معادلهٔ (۷-۲۳)] با پذیرفتاری اسپینی پائولی اندازه‌گیری شده برای فلزات قلیایی . توجه کنید که مقدار تجربی همان سهم اسپین الکترون رسانش است و نه پذیرفتاری کلی.

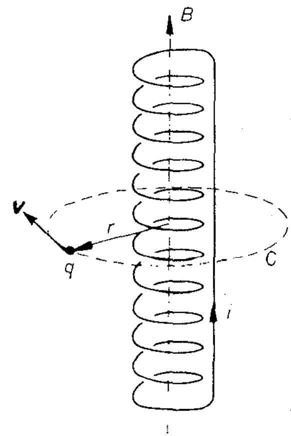
Cs	Rb	K	Na	Li	
۱/۰	۱/۰	۱/۱	۱/۴	۲/۵	(تجربی) $10^5 \times \chi_p$
۰/۵۸	۰/۶۳	۰/۶۷	۰/۸۳	۱/۰۱	(نظری) $10^5 \times \chi_p$

داده‌ها در این جدول از مرجع زیر، با تبدیل به واحدهای *SI*، به دست آمده‌اند:

Aschcroft and Mermin [11] *, p. 664.*

۷-۳-۱ اندازه حرکت در میدان مغناطیسی

ذره‌ای ساکن به جرم M و بار q را در فاصلهٔ r از نقطه‌ای واقع بر محور یک سیملولهٔ طویل حامل‌جریان مطابق شکل ۷-۶ در نظر می‌گیریم. برای سهولت فرض می‌کنیم که سیملوله ابررساناست، به گونه‌ای که، اگر دو سر آن مطابق شکل به هم وصل شود تا یک مدار کامل بسازد، بدون منبع تغذیهٔ خارجی، به طور همیشگی جریان حمل می‌کند. اگر این سیملوله تا دمایی بالای دمای گذار ابررسانندگی‌اش گرم شود، جریان و در نتیجه میدان مغناطیسی افت می‌کند. *emf* القایی حاصل پیرامون دایرهٔ C، ذره را شتاب می‌دهد و به آن اندازه حرکتی برابر $M\mathbf{v}$ می‌دهد. این اندازه حرکت از کجا آمده است؟ یقیناً، به هنگام گرم کردن پیچه، هیچ نیرویی به دستگاه وارد نکرده‌ایم که سبب محوشدن جریان شود. این باطل نما رامی‌توان با این استدلال، که ذره در تمام مدت اندازه حرکت دارد، برطرف کرد؛ در ادامه نشان می‌دهیم که برای برقراری مجدد قانون پایستگی اندازه حرکت باید اندازه حرکت ذره را به صورت زیر بنویسیم



شکل ۷-۶: ذره‌ای باردار که به وسیلهٔ یک میدان مغناطیسی نزولی شتاب داده می‌شود. حرکت نشان داده شده مناسب ذره‌ای است که بارش منفی باشد.

$$\mathbf{p} = M\mathbf{v} + q\mathbf{A} \qquad (۲۵-۷)$$

که در آن **A** پتانسیل برداری مغناطیسی است (**A** میدان مغناطیسی را از طریق $\mathbf{B} = curl\ \mathbf{A}$ تعیین می‌کند). اندازه حرکت $q\mathbf{A}$، که یک ذره باردار در حال **سکون** دارد به **اندازه حرکت الکترومغناطیسی** موسوم است؛ در آزمایشی که در بالا توضیح داده شد، اندازه حرکت ذره در آغاز تماماً الکترومغناطیسی است و در حالت پایانی تماماً به شکل جنبشی $M\mathbf{v}$ است.

برای اثبات اینکه اندازه حرکتی که با معادلهٔ (۷-۲۵) تعریف می‌شود، در فرایند بالا، پایسته است فرض می‌کنیم که جریان در زمانی کوتاه افت کند، به گونه‌ای که حرکت ذره در طول دورهٔ افت جریان قابل اغماض باشد. این فرض فقط به خاطر ساده سازی محاسبه است؛ نتیجه‌ای که به دست می‌آید یک نتیجهٔ عام است. اندازه حرکت جنبشی‌ای که ذره کسب می کند ضربه‌ای است از نیرویی که بر آن وارد می‌شود. یعنی

$$M\mathbf{v} = \int q\mathbf{E}\ dt \qquad (۲۶-۷)$$

میدان الکتریکی **E** در مکان ذره با قانون فارادی داده می‌شود

$$\oint_C \mathbf{E}\cdot d\mathbf{l} = -\frac{d\Phi}{dt} \qquad (۲۷-۷)$$

که در آن Φ شار مغناطیسی است که از C می‌گذرد. میدان الکتریکی را به پتانسیل برداری مغناطیسی **A** مربوط می‌کنیم. اگر سیملولهٔ شکل ۷-۶ طویل باشد، میدان **B** در مکان ذره بینهایت کوچک است؛ ولی **A** باید در آنجا متناهی باشد تا در بایست زیر را برآورده کند:

$$\Phi = \iint \mathbf{B}\cdot d\mathbf{S} = \iint curl\ \mathbf{A}\cdot d\mathbf{S} = \oint_C \mathbf{A}\cdot d\mathbf{l} \qquad (۲۸-۷)$$

که در آن انتگرالهای سطحی روی سطح دایرهٔ C است. با درج این مقدار برای Φ در معادلهٔ (۷-۲۷) داریم

$$\oint_C \mathbf{E}\cdot d\mathbf{l} = -\oint \frac{d\mathbf{A}}{dt}\cdot d\mathbf{l} \qquad (۲۹-۷)$$

به کمک تقارن شکل ۷-۶، **E** باید در طول دایرهٔ C ثابت باشد، همچنین می‌توانیم **A** را به نحوی انتخاب کنیم که این خاصیت را داشته باشد[1]. در این حالت از معادلهٔ (۷-۲۹) درمی‌یابیم

۱- **E** کمیتی است اندازه‌پذیر و لذا تقارن استوانه‌ای‌اش به وسیلهٔ دستگاه تضمین می‌شود. $\mathbf{B}=curl\mathbf{A}$ نیز کمیتی است اندازه پذیر و باید تقارن استوانه‌ای داشته باشد. **A** را نمی‌توان اندازه گرفت و افزودن $\nabla\theta$ به آن، که در آن θ هر تابع نرده‌ای از مکان است، پتانسیل برداری را به همان صورت پذیرفتنی به دست می‌دهد

که

$$\mathbf{E} = -\frac{d\mathbf{A}}{dt} \qquad (۳۰-۷)$$

در نتیجهٔ معادلهٔ (۷-۲۶) را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$M\mathbf{v} = -\int \frac{d\mathbf{A}}{dt}\, dt = -q\int d\mathbf{A} = -q\Delta\mathbf{A} = -q\mathbf{A}_{\circ} \qquad (۳۱-۷)$$

$\mathbf{A}_{\circ}$ مقدار $\mathbf{A}$ قبل از افت است؛ مقدار $\mathbf{A}$ در نهایت صفر می‌شود. معادلهٔ (۷-۳۱) ثابت می‌کند اندازه حرکتی که با معادلهٔ (۷-۲۵) تعریف می‌شود، در واقع پایسته است.

بحث ما تا به اینجا کلاسیکی بوده است؛ برای کشاندن بحث به مکانیک کوانتومی اندازه حرکت $\mathbf{p}$ در معادلهٔ (۷-۲۵) را باید با عملگر $-i\hbar\nabla$ تعویض کنیم. بحث بیشتر پیرامون این مطلب در پیوست (ج) خواهد آمد. در باقیماندهٔ این فصل معادلهٔ (۷-۲۵) رادر مورد الکترون، با نشاندن $q \rightarrow -e$ و $M \rightarrow m$، به کار می‌بریم.

۷-۳-۲ استتار به وسیلهٔ جریانهای القایی

از نظر کلاسیکی متوسط سرعت $\mathbf{v}$ ی یک الکترون در تعادل گرمایی صفراست. لذا هیچ جریان‌القایی‌ای وجود ندارد؛ بنابراین به کمک معادلهٔ (۷-۲۵) اندازه حرکت متوسط $<\mathbf{p}>$ برابر $-e\mathbf{A}$ است و با تغییر میدان مغناطیسی تغییر می‌کند. از نظر مکانیک کوانتومی یکی گرفتن $\mathbf{p}$ با $-i\hbar\nabla$ به آن معناست که $\mathbf{p}$ با هندسهٔ تابع موج تعیین می‌شود. محبوس شدن الکترونهای اتمی به وسیلهٔ جاذبهٔ کولنی هسته این معنی را می‌دهد که فقط حالتهای الکترونی گسسته‌ای با توابع موج متعامد و از نظر کیفی متفاوت (که به عنوان مثال در تعداد گره‌ها با هم اختلاف دارند) وجود دارند؛ انرژی این حالتها نوعاً $1eV$ از هم فاصله دارد. لذا توابع موج اتمی درجه‌ای از صلبیت دارند، به طوری که این توابع موج فقط اندکی به وسیلهٔ میدان مغناطیسی ضعیف مختل می‌شوند؛ با استفاده از زبان نظریهٔ اختلال می‌توان گفت که تابع موج تا مرتبهٔ اول اختلال تغییر نمی‌کند. این حدس منطقی است که یک تابع موج اتمی نمی‌تواند زیاد تغییر کند مگر آنکه میدان اعمال شده آن قدر بزرگ باشد که مدارهای سیکلوترونی الکترون آزاد با ابعاد اتمی بسازد (بخش ۵-۵-۳ را ببینید).

به دلیل همین صلبیت توابع موج اتمی، می‌توانیم انتظار داشته باشیم که $<\mathbf{p}>$ است که

(همان $\mathbf{B}$ را می‌دهد، زیرا $curl(\nabla\theta)=\circ$). $\nabla\theta$ و در نتیجه $\mathbf{A}$ لزومی ندارد تقارن استوانه‌ای داشته باشند. می‌توانیم $\mathbf{A}$ را وادار به داشتن تقارن استوانه‌ای در هندسهٔ شکل ۷-۶ کنیم. برای این کار شرط اضافی $\mathbf{div}\ \mathbf{A}=\circ$ را اعمال می‌کنیم. اگر چنین کنیم، معادلات ساده‌تر می‌شوند.

ثابت می‌ماند و $<\mathbf{v}>$ است که با اعمال میدان تغییر می‌کند. اگر چنین باشد، آنگاه از معادلهٔ (۷-۲۵)، سرعت القایی برابر $\mathbf{v} = -q\mathbf{A}/M = e\mathbf{A}/m$ و چگالی جریان القایی حاصل عبارت است از

$$\mathbf{j} = n(-e)\mathbf{v} = -\frac{ne^2}{m}\mathbf{A} \tag{۷-۳۲}$$

از آنجاکه چگالی الکترون مستقل از زمان است، باید داشته باشیم $div\,\mathbf{j} = 0$. از این رو معادلهٔ (۷-۳۲) تنها در صورتی معتبر است که $\mathbf{A}$ آنچنان انتخاب شود که $div\,\mathbf{A} = 0$ [1].

برای نشان دادن اینکه معادلهٔ (۷-۳۲) نشانگر استتار میدان مغناطیسی اعمالی به وسیلهٔ الکترونها است، با استفاده از $\mathbf{B} = curl\,\mathbf{A}$ و معادلهٔ ماکسول (در مورد میدانهای استاتیکی) $curl\,\vec{B} = \mu_0\mathbf{j}$ به دست می‌آوریم [2]

$$curl\ curl\ \mathbf{A} = curl\,\mathbf{B} = \mu_0\,\mathbf{j} = -\frac{\mu_0 ne^2}{m}\mathbf{A}$$

بااستفاده‌از اتحادبرداری $curl\ curl\ \mathbf{A} = grad\,(div\,\mathbf{A}) - \nabla^2\mathbf{A}$ و یادآوری اینکه $div\,\mathbf{A} = 0$، این معادله چنین می‌شود:

$$\nabla^2\mathbf{A} = \frac{\mu_0 ne^2}{m}\mathbf{A} = \frac{1}{\lambda^2}\mathbf{A} \tag{۷-۳۳}$$

که در آن $\lambda = (m/\mu_0 ne^2)^{1/2}$ یک طول مشخصه است؛ جوابهای معادلهٔ (۷-۳۳) دارای این خاصیت است (مسئلهٔ ۷-۷ راببینید) که با رفتن به درون ناحیه‌ای حاوی الکترونها، مانند یک اتم، $\mathbf{A}$ و بنابراین $\mathbf{B}$ به طور نمایی افت می‌کنند.

طول مشخصهٔ این افت برابر λ است و اگر این طول را با ابعاد اتمی مقایسه کنیم خواهیم دید که الکترونهای اتمی چقدر در استتار میدان مغناطیسی اعمالی مؤثرند. چگالی نوعی الکترون در یک اتم برابر $1\,electron/\text{Å}^3$ است، به طوری که $n \sim 10^{30}\ m^{-3}$. از این رو

$$\lambda = \left(\frac{m}{\mu_0\, ne^2}\right)^{\frac{1}{2}} \sim \left(\frac{10^{-30}}{10^{-6}\times 10^{30}\times 10^{-38}}\right)^{\frac{1}{2}} = 10^{-8}\,m = 100\ \text{Å} \tag{۷-۳۴}$$

۱- برای هر انتخاب دیگری از $\mathbf{A}$، چشم‌پوشی از تغییر $<\mathbf{p}>$ دیگر درست نیست.

۲- در این بخش پاسخ محیط در مقابل میدان مغناطیسی، به جای مغناطش هم‌ارز آن، با چگالی جریان $\mathbf{j}$ توصیف می‌شود؛ بنابراین می‌توانیم قرار دهیم $\mathbf{B}=\mu_0\mathbf{H}$. در به دست آوردن معادلهٔ (۷-۳۳) از وابستگی فضایی n صرفنظر کرده‌ایم و فرض کرده‌ایم به جای آن مقدار متوسط آن را بنشانیم؛ چون قصد ما فقط رفتار کیفی است، این فرضی است پذیرفتنی.

که به مراتب بزرگتر از اندازهٔ یک اتم است. بنابراین میدانهای مغناطیسی فقط اندکی از یک اتم استتار می‌شوند و در بخش آینده گشتاور دیا مغناطیسی اتم را با به کاربردن معادلهٔ (۷-۳۲) همراه با پتانسیل برداری $\mathbf{A}$ ی میدان ***اعمال شده*** محاسبه خواهیم کرد. بنابراین، حتیٰ اگر ویژه توابع اتمی توسط یک میدان مغناطیسی به طور کامل مختل نشده بمانند، دیا مغناطیس حاصل بسیار ضعیف است. در مقیاس اتمی، لختی الکترونها بزرگتر از آن است که آنها بتوانند جریانهای استتاری مؤثری فراهم کنند.

وقتی توابع موج الکترونی در ناحیه‌ای بزرگتر گسترده باشند، نظیر توابع موج الکترونهای رسانش در یک فلز، معمولاً به وسیلهٔ یک میدان مغناطیسی به شدت مختل می‌شوند؛ در این صورت تغییر در $< \mathbf{p} >$ از مرتبهٔ $e\mathbf{A}$- و جریانهای استتاری کوچک است و دیا مغناطیس ضعیف باقی می‌ماند. محاسبهٔ دیا مغناطیس لاندائو، برای فلزات آزاد این مطلب را تأیید می‌کند (در بخش ۷-۲-۴ را ببینید). **دیا مغناطیس ضعیف لاندائو** مربوط به فلزات عادی نقطهٔ مقابل وضعیت در ابر رساناهاست؛ در فصل ۱۰ خواهیم دید که توابع موج الکترون ابررسانا فقط اندکی به وسیلهٔ میدان مغناطیسی مختل می‌شوند و لذا افت میدان، که به وسیلهٔ معادلهٔ (۷-۳۳) پیشگویی می‌شود، در مقیاس ماکروسکوپی روی می‌دهد.

۷-۳-۳ محاسبهٔ پذیرفتاری دیا مغناطیسی

برای محاسبهٔ گشتاور مغناطیسی القا شده در یک اتم به وسیلهٔ میدان اعمالی و در نتیجه برای محاسبهٔ پذیرفتاری مغناطیسی، از معادلهٔ (۷-۳۲) استفاده خواهیم کرد. دستگاه مختصات استوانه‌ای را با مبداء واقع در مرکز اتم به کار می‌بریم و مطابق شکل ۷-۷، محور z را موازی $\mathbf{B}$ انتخاب می‌کنیم. با استفاده از معادلهٔ (۷-۲۸) می‌توان نشان داد که میدان یکنواخت را می‌توان با پتانسیل برداری به صورت زیر توصیف کرد (مسئلهٔ ۷-۶) :

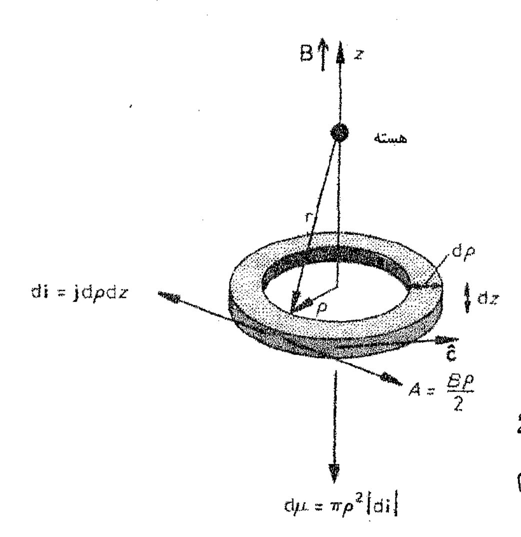
$$\mathbf{A} = \hat{c}\; B\rho / ۲ \qquad \text{(۳۵-۷)}$$

که در آن $\hat{c}$ بردار یکه در جهت مماس بر حلقهٔ دایره‌ای به شعاع ρ در شکل ۷-۷ است. این پتانسیل‌برداری معادلهٔ $div\ \mathbf{A} = ۰$ را نیز برآورد می‌کند و لذا برای به کار بردن در معادلهٔ (۷-۳۲)، پتانسیل برداری مناسبی است.

از معادلهٔ (۷-۳۲)، چگالی جریان عبارت است از

$$\mathbf{J} = -\frac{ne^{۲}}{m} A = -\hat{c}\;\; \frac{ne^{۲} B\rho}{۲m} \qquad \text{(۳۶-۷)}$$

اگر برای ساده سازی فرض کنیم که n درون حلقهٔ دایره‌ای شکل ۷-۷ ثابت است، در آن صورت



شکل ۷-۷: عنصر جریان برای محاسبهٔ گشتاور دو قطبی مغناطیسی μ یک اتم ناشی از جریانهای استتاری القایی.

سهم $d\mu$ مربوط به این حلقه در گشتاور مغناطیسی اتم همان سهم حلقه‌ای با جریان زیر است:

$$d\mathbf{i} = \mathbf{j}\ d\rho\, dz = -\hat{c}\ \ ne^{2}\ B\rho\ d\rho\ d_z\, /\, 2m$$

بنابراین، مطابق قانون‌آمپر، معادلهٔ (۷-۳)، داریم

$$d\vec{\mu} = -\hat{z}\ \ |\ d\mathbf{i}\ |\ \pi\rho^{2}\ = -\mathbf{B}\ \frac{ne^{2}\rho}{2m}\ \pi\rho^{2}\ d\rho\, dz$$

و گشتاور القایی کل وارد بر اتم عبارت است از

$$\vec{\mu} = -\mathbf{B}\ \frac{e^{2}}{4m}\ \int\!\!\int n\rho^{2}\ 2\pi\rho\, d\rho\, dz\ = -\mathbf{B}\ \frac{e^{2}}{4m}\ \int n\,\rho^{2}\ dV$$

که در آن $dV = 2\pi\rho\, d\rho\, dz$ حجم حلقه است. چون $\int n\ dV = Z$، که در آن Z تعداد کل الکترونهای موجود در اتم‌است، می‌توان نوشت $\int n\rho^{2}\, dV = Z <\rho^{2}>$، که در آن $<\rho^{2}>$ میانگین مجذور فاصلهٔ الکترونها از محور z است. بنابراین

$$\vec{\mu} = -\frac{Ze^{2}}{4m}\ <\rho^{2}>\mathbf{B} \qquad \textbf{(۳۷-۷)}$$

توجه کنید که وقتی توزیع الکترونها تقارن کروی داشته باشد، $<\rho^{2}> = \frac{2}{3}\ <r^{2}>$ که در آن $<r^{2}>$ میانگین مجذور فاصلهٔ الکترونها از هسته است (شکل ۷-۷ را ببینید)؛ در این صورت به جای عدد ۴ در مخرج کسر در معادلهٔ (۷-۳۷) عدد ۶ درج می‌شود و این نشان می‌دهد که این تعویض صورت گرفته است.

این محاسبه برای یک اتم منزوی مناسب است، ولی چون اثرهای دیا مغناطیسی ضعیف‌اند، می‌توان در هر اتم از اثر حاصل از گشتاورهای القایی اتمهای همسایه روی میدان صرفنظر کرد و قرارداد $\mathbf{B} = \mu_\circ \mathbf{H}$ ، که در آن $\mathbf{B}$ میدان اعمال شدهٔ خارجی است. بنابراین مغناطش برای N اتم یکسان در واحد حجم عبارت است از

$$\mathbf{M} = N\vec{\mu} = -\frac{NZe^۲}{۴m} <\rho^۲> \mathbf{B} \quad (۳۸\text{-}۷)$$

از مقایسه با معادلهٔ (۷-۱) پذیرفتاری مغناطیسی را به صورت زیر مشخص می‌کنیم.

$$\chi = -\frac{NZe^۲ \mu_\circ}{۴m} <\rho^۲> = -\frac{<\rho^۲>}{۴\lambda^۲} \sim ۱۰^{-۵} \quad (۳۹\text{-}۷)$$

برای به دست آوردن مرتبهٔ بزرگی χ ، از طول استتار تخمینی λ ، که در بخش پیشین محاسبه شد، استفاده کردیم و قرار داده‌ایم $<\rho^۲> \sim a_\circ^۲$ ، که در آن $a_\circ = ۰/۵۳\ \text{Å}$ شعاع بور است. دقیقتر بگوییم، از معادله (۷-۳۹) می‌توان انتظار داشت که کمیت $۴m\chi/\mu_\circ NZe^۲a_\circ^۲$ از مرتبهٔ واحد باشد؛ جدول (۷-۴)، که مقادیر این کمیت و مقادیر پذیرفتاری مولی را برای گازهای بی اثر به دست می دهد، مؤید این مطلب است.

جدول ۷-۴: مقادیر پذیرفتاری مولی χ_M (برحسب $m^۳mol^{-۱}$) برای اتمهای گازهای بی‌اثر. پذیرفتاری مولی با معادلهٔ (۷-۳۹) داده می‌شود، با این تفاوت که در آن N جای خود را به عدد آواگادرو N_A ، داده است. از این رو کمیت $-۴m\chi_M/N_A\mu_\circ Ze^۲a_\circ^۲$ باید از مرتبهٔ واحد باشد. خواص دیا مغناطیسی یک اتم‌گاز بی‌اثر، با تقریب خوبی، از حالت (گاز ، مایع ، جامد) اتم مستقل هستند.

	He	Ne	Ar	Kr	Xe
$\chi_M\ (۱۰^{-۱۱} m^۳ mol^{-۱})$	-۲/۳۶	-۸/۴۷	-۲۴/۶	-۳۶/۲	-۵۵/۲
Z	۲	۱۰	۱۸	۳۶	۵۴
$\frac{-۴m\chi_M}{N_A\mu_\circ Ze^۲a_\circ^۲}$	۰/۷۹	۰/۵۷	۰/۹۱	۰/۶۷	۰/۶۸

داده‌های این جدول با مجوز از مرجع زیر اقتباس شده‌اند، و مقادیر آنها به واحدهای SI تبدیل شده‌اند (با ضرب مقدار cgs برحسب $cm^۳ mol^{-۱}$ در $۴\pi \times ۱۰^{-۶}$):

Handbook of Chemistry and Physics, 61st edn. Copyright CRC Press Inc. Beca Raton, Florida.

مسایل ۷

۷-۱ برای الکترونی واقع در پایین‌ترین حالت انرژی اتم هیدروژن در مدل بور، میدان مغناطیسی حاصل از الکترون دور هسته را، در هسته بر حسب تسلا محاسبه می‌کنید.
(ولی دقت کنید که محاسبهٔ صحیح مکانیک کوانتومی نشان می‌دهد که الکترون در حالت پایهٔ خود اندازه حرکت زاویه‌ای صفر دارد و لذا میدان مغناطیسی‌ای تولید نمی‌کند.)

۷-۲ قواعد هوند را در مورد یک پوستهٔ $4f$، که الکترون دارد، به کار برید و نشان دهید که

$$S = \begin{cases} n/2 & \text{برای } n \leq 7 \\ (14-n)/2 & \text{برای } n \geq 7 \end{cases}$$

$$L = \begin{cases} n(7-n)/2 & \text{برای } n \leq 7 \\ (14-n)(n-7)/2 & \text{برای } n \geq 7 \end{cases}$$

$$J = \begin{cases} n(6-n)/2 & \text{برای } n \leq 6 \\ (14-n)(n-6)/2 & \text{برای } n \geq 6 \end{cases}$$

از این نتایج استفاده کنید و مقادیر S، L و J، که از جدول ۷-۱ برای عناصر خاکی کمیاب به دست می‌آیند، را بیازمایید.

۷-۳ جفتیدگی $\mathbf{L}$ و $\mathbf{S}$ برای به دست آوردن $\mathbf{J}$ را می‌توان با نموداربرداری زیر نمایش داد:
گشتاور مغناطیسی به شکل $\vec{\mu} = -\mu_B(\mathbf{L} + 2\mathbf{S})$ است، [معادلهٔ (۷-۷)]. $\vec{\mu}$ برخلاف $\vec{J}$ کوانتومی‌مناسبی نیست، به‌گونه‌ای که فقط مؤلفهٔ درراستای $\mathbf{J}$ درخواص مغناطیس سهیم است (مؤلفه عمود بر $\mathbf{J}$ گاهی به عنوان‌برداری که حرکت تقدیمی سریعی حول $\mathbf{J}$ دارد، تصور می‌شود و بنابراین متوسط‌گیری آن صفر به دست می‌دهد). نشان دهید گشتاور مؤثر را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\vec{\mu} = \frac{\mathbf{J}}{|\mathbf{J}|}\mu_B(|\mathbf{L}|\cos\theta + 2|\mathbf{S}|\cos\phi)$$

و از آنجا عامل gی لانده در معادلهٔ (۷-۱۰) را محاسبه کنید.

۷-۴ مهمترین سهم درخاصیت پارا مغناطیسی $CuSO_4$ ناشی از یونهای Cu^{2+} است، که برای آن گشتاور مغناطیسی حاصل از تک اسپین جفت نشده است ($g=2$، $J = S = \frac{1}{2}$، $L = 0$). احتمال آن که این گشتاور در دمای T موازی یا پاد موازی با میدان قرار گیرد چقدر است؟ از آنجا نشان دهید که مغناطش برای N یون در واحد حجم واقع در میدان

B عبارت است از

$$M = N\mu_B \tanh\left(\mu_B B / k_B T\right)$$

انرژی داخلی یونهای واقع در میدان ثابت B را به دست آورید و از آنجا ظرفیت گرمایی مغناطیسی C_Bرا محاسبه کنید. شکل حدی ظرفیت گرمایی را در دماهای بالا و پایین به دست آورید. C_Bرا به صورت تابعی از دما رسم کنید. اگر $B = ۰/۵T$، دمای بالا چه دمایی است؟

۷-۵ در به دست آوردن پذیرفتاری اسپینی پائولی برای الکترونهای آزاد موجود در یک فلز، فرض کردیم که $\mu_B B \ll \varepsilon_F$. نشان دهید که رابطه **دقیق** بین مغناطش اسپینی M و میدان B برای گاز الکترون آزاد در صفر مطلق را می‌توان ، به شرط آنکه $M < M_s$ ، به صورت زیر نوشت :

$$\frac{۲\mu_B B}{\varepsilon_F} = \left(۱ + \frac{M}{M_s}\right)^{۲/۳} - \left(۱ - \frac{M}{M_s}\right)^{۲/۳}$$

که در آن ε_F انرژی فرمی و M_s مغناطش اشباعی است. انرژی بالاترین تراز اشغال شده (متفاوت با ε_F) در شکل ۷-۵ را باید طوری برگزینید که مساحت هاشور زده برابر با تعداد الکترونها شود).

میدان مغناطیسی لازم برای اشباع مغناطش اسپینی را برای پتاسیم (با $N = ۱/۴ \times ۱۰^{۲۸} m^{-۳}$)، برآورد کنید. میدان لازم در دمای $T = ۰$ را برای اشباع مغناطش اسپینی‌هسته‌ای مربوط به اتمهای ^{۳}He که با غلظت ۱/۰٪ در مخلوط مایع ^{۳}He و ^{۴}He حضور دارند، برآورد کنید. (^{۳}He شبیه گاز تبهگن فرمی عمل می‌کند و گشتاور هسته‌ای هر اتم آن $۲/۱ \times ۱۰^{-۲۶} J T^{-۱}$ است؛ چگالی کل مایع را $۱۳۰ \; kg m^{-۳}$ بگیرید.)

۷-۶ معادلهٔ (۷-۲۸) را به کاربرید و پتانسیل‌برداری مغناطیسی را در مکان ذره، هنگامی که شار Φ از دایرهٔ C در شکل ۷-۵ می‌گذرد، محاسبه کنید. نشان دهید که این پتانسیل برداری در معادلهٔ $div\, \mathbf{A} = ۰$ صدق می‌کند.

نشان دهید که معادلهٔ (۷-۳۵)، پتانسیل برداری یک میدان یکنواخت را به دست می‌دهد که در $div\, \mathbf{A} = ۰$ صدق می‌کند.

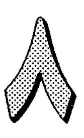
۷-۷ نشان دهید که $\mathbf{A} = A_۰ \hat{y} \exp(-x/\lambda)$ جوابی است از معادلهٔ (۷-۳۳)، برای نفوذ پتانسیل برداری به درون ناحیه‌ای شامل الکترونهایی با بردار موج صلب، به شرط آنکه این ناحیه فضای $x > ۰$ را اشغال کرده باشد. میدان مغناطیسی $\mathbf{B}$ و چگالی جریان القایی $\mathbf{j}$ را

برای این جواب به دست آورید.

۸-۷ اتمهای کربن در بنزن، شش ضلعی منظمی به ضلع Å ۱/۴ می‌سازند. یکی از الکترونهای خارجی از هر اتم تابع موجی دارد که روی تمامی حلقهٔ اتمها گسترده می شود (سه الکترون خارجی دیگر مربوط به هر اتم در اوربیتالهای اتمی sp^2 هستند). سهم این الکترونها در پذیرفتاری دیا مغناطیسی بنزن مایع را با تقریب برآورد کنید (چگالی بنزن (C_6H_6) برابر $880\,kgm^{-3}$، وزن مولکولی آن برابر ۷۸ برابر است). مقدار تجربی χ برای بنزن $-7/7\times10^{-6}$ است.

خوب است که نیرو، خاصیت و دستاوردهای کشفها را مشاهده کنیم، و اینها را هیچ جایی آشکارتر از سه کشف زیر که برای پیشینیان ناشناخته بودند نمی‌توان مشاهده کرد، منشاء این کشفها، با همهٔ تازگی آنها، تیره ، مبهم و گمنام است؛ این کشفها عبارتند از چاپ، باروت ، آهن ربا (یعنی عقربهٔ قطب نمای دریانوردان)، به خاطر این سه کشف، تمامی چهرهٔ چیزها در سرتاسر دنیا تغییر کرده است.

فرانسیس بیکن (۹۴۰-۱۰۰۵ / ۱۵۶۱-۱۶۲۶)



نظم مغناطیسی

۸-۱ مقدمه

در دماهای پایین مشاهد شده است که در غیاب یک میدان مغناطیسی اعمالی، تعداد زیادی از مواد پارامغناطیسی دارای یک مغناطش متناهی‌اند. این **مغناطش خود به خودی** ناشی از همخط شدن گشتاورهای دو قطبی دائمی است و نمایشگر آن است که هر دو قطبی از جهت دو قطبیهای دیگر آگاهی دارد. این آگاهی ناشی از برهم کنشهای بین گشتاورهایی است که از آنها در محاسبهٔ پارا مغناطیس در فصل قبل چشم پوشی کردیم. گذار به حالتی که در آن دوقطبیها همخط می‌شوند نشانگر افزایش درجهٔ نظم درون جامد و در نتیجه کاهش آنتروپی است. ساده‌ترین نوع نظم مغناطیسی، **نظم فرو مغناطیسی** است (بخش ۸-۳) که در آن تمامی گشتاورها به طور مساوی در مغناطش خودبه خودی سهیم‌اند. نظم در **پاد فرو مغناطیسها** (بخش ۸-۴) چنان است که هیچ مغناطش خودبه خودی در آنها وجود ندارد، زیرا نیمی از دوقطبیها در یک جهت و نیم دیگر در جهت مخالف به صف در می‌آیند. در **فری مغناطیسها**(بخش ۸-۶-۱) گشتاورهایی در جهتهای مخالف وجود دارند که یکدیگر را حذف نمی‌کنند و بنابراین یک مغناطش خود به خودی خالص وجود دارد.

برهم‌کنش مغناطیسی بین دو قطبیها **کوچکتر از آن** است که بتواند مسئول نظم مغناطیسی باشد. برای نشان دادن این موضوع، برهم کنش مغناطیسی بین دو گشتاور به بزرگی μ_B و به فاصلهٔ $r = ۳\text{Å}$ از یکدیگر را تخمین می‌زنیم؛ میدان B ناشی از یکی از این دو گشتاور، در نقطه‌ای که گشتاور دیگر در آن واقع است از مرتبهٔ $\mu_۰ \mu_B / ۴\pi r^۳$ است، درنتیجه انرژی برهم‌کنش را می‌توان چنین برآورد کرد.

$$\Delta E \sim \mu_B B \sim \frac{\mu_۰ \mu_B^۲}{۴\pi r^۳} \sim \frac{۱۰^{-۷} \times ۱۰^{-۴۶}}{۳ \times ۱۰^{-۲۹}} \sim ۳ \times ۱۰^{-۲۵} J \sim ۲ \times ۱۰^{-۶} eV$$

این انرژی در دمایی از مرتبهٔ $۰/۰۳ K$ برابر است با $k_B T$ است. در دماهای بالاتر از این دما، بی‌نظمی گرمایی کاتوره‌ای برای از بین بردن همراستایی گشتاورهای مغناطیسی حاصل از این سازوکاز کافی است. تعداد زیادی از فرومغناطیسها مغناطش خود به خودی را در دماهایی از مرتبهٔ $۱۰۰۰ K$ نیز حفظ می‌کنند، که نشانگر برهم کنش بسیار قوی‌تری است. تنها امکانی که وجود دارد آن است که این برهم‌کنش از برهم کنشهای الکتروستاتیکی الکترونها با یکدیگر و با هسته‌های موجود در جامد ناشی می‌شود؛ **تبادل** سازوکاری را فراهم می‌سازد که توسط آن انرژی برهم کنش الکتروستاتیکی دو الکترون می‌تواند به سمتگیری نسبی گشتاورهای مغناطیسی آنها بستگی داشته باشد.

۸-۲ برهم کنش تبادلی

در اینجا به شرح کیفی برهم کنش تبادلی می‌پردازیم؛ بحث کامل‌تر در پیوست (د) ارائه شده است. این برهم کنش پیامدی از این حقیقت است که تابع موج دو الکترون باید تحت تبادل تمام مختصات الکترون، فضا و اسپین پادمتقارن باشند:

$$\psi(\mathbf{r}_۱, \mathbf{s}_۱, : \mathbf{r}_۲, \mathbf{s}_۲) = -\psi(\mathbf{r}_۲, \mathbf{s}_۲ : \mathbf{r}_۱, \mathbf{s}_۱)$$

در نتیجه وقتی مختصات دو الکترون یکسان باشند: $\mathbf{s}_۱ = \mathbf{s}_۲$ ، $\mathbf{r}_۱ = \mathbf{r}_۲$ ، تابع موج صفر می‌شود. بنابراین احتمال یافتن دو الکترون با اسپین یکسان در یک نقطه از فضا صفر است. از این رو پاد متقارن بودن تابع موج به جدا از هم نگهداشتن الکترونهای با اسپین موازی تمایل دارد، به نحوی که مقدار چشم داشتی انرژی دافعهٔ کولنی $e^۲ / ۴\pi \varepsilon_۰ | \mathbf{r}_۱ - \mathbf{r}_۲ |$ برای حالت با اسپینهای موازی کوچکتر از مقدار چشمداشتی انرژی فوق برای حالت با اسپینهای پاد موازی است. این برهم کنش تبادلی است و می‌توان آن را به شکل $-۲J\, \mathbf{S}_۱ . \mathbf{S}_۲$ نمایش داد که این انرژی متناظر است با آنکه انرژی کولنی حالت اسپین موازی به اندازهٔ $۲J$ از انرژی مربوط به اسپین پادموازی کمتر است (پیوست (د) و مسئلهٔ ۸-۱ را ببینید).

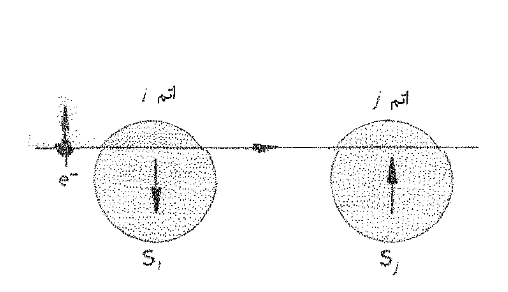
بحث اخیر پیشنهاد می‌کند که J مثبت است و همراستایی فرومغناطیسی (موازی) اسپینها ترجیح داده می‌شوند؛ برهم کنشهای تبادلی بین الکترونهای موجود در یک اتم قاعدهٔ اول هوند را بیان می‌کند(بخش ۷-۲-۱). برهم کنش کولنی بین دو الکترون در اتمهای متفاوت نیز، به دلیل پاد متقارن بودن تابع موج به سمتگیری اسپینی نسبی آنها بستگی دارد ولی انرژی تبادل J با افزایش فاصلهٔ بین اتمها به سرعت کاهش می‌یابد؛ ناحیهٔ $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ دیگر آنچنان مهم نیست، در نتیجه این بحث که J مثبت است دیگر به کار نمی‌رود. یک مقدار منفی برای J مربوط به نزدیکترین همسایگان باعث برتری اسپین‌های پادموازی و بنابراین نظم پادفرو مغناطیسی می‌شود.

این نوع تبادل که در بالا توصیف شد به **تبادل مستقیم** معروف است. تبادل مستقیم نمی‌تواند نظم مغناطیسی فلزات خاکی کمیاب را توضیح دهد، زیرا توابع موج $4f$ مربوط به اتمهای همسایه هم‌پوشی مختصری دارند. انواع دیگری از تبادل وجود دارند و اعتقاد بر آن است که سازوکار مهم در خاکیهای کمیاب؛ فرایند تبادل غیر مستقیمی است که در شکل ۸-۱ نشان داده شده است. **تبادل غیر مستقیم** به جفتیدگی بین اسپینها به شکل $-2J\,\mathbf{s}_1 . \mathbf{s}_2$ نیزمی‌انجامد که در آن J هم با افزایش فاصلهٔ بین اتمها تغییر علامت می‌دهد و هم بزرگی آن کاهش می‌یابد.

در عمل تعداد بیشماری اتم در جامد وجود دارد و معمولاً هر اتم بیش از یک الکترون مغناطیسی دارد. آغاز از یک برهم کنش تبادل به شکل فوق و رسیدن به **هامیلتونی هایزنبرگ** زیر برای انرژی تبادل تمامی جامد کاری است بس مشکل و مشتمل بر وضع فرضهای تردیدآمیز.

$$H = -\sum_{i}\sum_{j\neq i} J_{ij}\ \mathbf{S}_i . \mathbf{S}_i \qquad (۸-۱)$$

در اینجا $-2J_{ij}\ \mathbf{S}_i . \mathbf{S}_j$ سهم اتمهای i و j است [1]، و $\hbar\mathbf{S}_i$ و $\hbar\mathbf{S}_j$ ، به ترتیب، گشتاور



شکل ۸-۱ : برهم کنش تبادل غیر مستقیم - جهت قطبش اسپین یک الکترون رسانش تحت تأثیر برهم کنش تبادل مستقیم آن با گشتاور مغناطیسی اتم i قرار می‌گیرد؛ آنگاه اتم j قطبش آن الکترون رسانش را احساس می‌کند و در نتیجه به طور غیرمستقیم با اتم i برهم کنش می‌کند.

۱- ضریب ۲ در $-2J\ \mathbf{S}_1\mathbf{S}_2$ در معادلهٔ ۸-۱ ظاهر نمی‌شود. این از شمارش دوبارهٔ یک برهم کنش جلوگیری می‌کند؛ انرژی تبادل را چنان در نظر می‌گیریم که به طور مساوی بین دو اتم تقسیم می‌شود.

زاویه‌ای کل الکترونهای موجود در اتمهای i و j است، با وجود این، قرارداد ایجاب می‌کند که این گشتاورها، به اسپینها نسبت داده شوند و با S نشان داده شوند، بر خلاف قرارداد متداول در مبحث پارا مغناطیس یونها که نماد J به کار می‌رود (بخش ۷-۲). با اختیار S برای نمایش یک اندازه حرکت زاویه‌ای **موازی** با گشتاور مغناطیسی، مسئله از این هم بیشتر پیچیده خواهد شد. این کار را نخواهیم کرد زیرا این عمل می‌تواند به آسانی به علامت‌های نادرست حاصل از معادلات مبین دینامیک اسپینها منجر شود (بخش ۸-۵)؛ در عوض الکترونها راکماکان به منزلهٔ ذرات با بار منفی؛ با گشتاورهای مغناطیسی **پادموازی** با اندازه حرکت زاویه‌ای آنها در نظر می‌گیریم. هامیلتونی‌هانیزبرگ نقطهٔ آغاز بسیاری از محاسبات مربوط به خواص مواد با نظم مغناطیسی است.

۸-۳ فرو مغناطیس

۸-۳-۱ میدان مولکولی وایس

قبل از پیدایش مکانیک کوانتومی، وایس پیشنهاد کرد که مغناطش خودبه خودی یون از همراستایی گشتاورهای مغناطیسی اتمی ناشی می‌شود و وجود **یک میدان مولکولی** متناسب با مغناطش را برای توجیه این همراستایی فرض کرد. وی پیشنهاد کرد که میدان مغناطیسی مؤثر بر هر گشتاور برابر است با

$$\mathbf{B}_{eff} = \mathbf{B}_{loc} + \lambda\mu_\circ \mathbf{M} \tag{۸-۲}$$

که در آن $\mathbf{B}_{loc}$ میدان مغناطیسی واقعی در محل اتم و $\lambda\mu_\circ \mathbf{M}$ میدان مولکولی وایس است. وارد کردن این مقدار $\mathbf{B}_{eff}$ در معادلهٔ (۸-۷) به جملهٔ اضافی $-\lambda\mu_\circ \vec{\mu} \cdot \mathbf{M}$ در انرژی گشتاور دو قطبی منجر می‌شود.

با تقریب زدن هامیلتونی هایزنبرگ [معادلهٔ (۸-۱)]، در زیر نشان می‌دهیم که چگونه برهم کنشهای تبادل می‌توانند میدان مولکولی وایس راپدید آورند. ماهیت این تقریب آن است که فرض کنیم اثری که برهم کنش تبادل اسپین $\mathbf{S}_i$ با اسپین دیگر $\mathbf{S}_j$، بر اسپین $\mathbf{S}_i$ دارد را می‌توان با تعویض $\mathbf{S}_i$ با مقدار متوسط آن $<\mathbf{S}>$ محاسبه کرد. توجه کنید که در یک ماده فرومغناطیسی $<\mathbf{S}>$ برای تمامی اسپینها یکسان است و با معادلهٔ زیر به مغناطش مربوط می‌شود.(معادلهٔ (۷-۱۱) را ببینید) [1]

$$\mathbf{M} = -Ng\mu_B <\mathbf{S}> \tag{۸-۳}$$

۱- از آنجا که $\mathbf{S}$ عموماً هم شامل سهمی از اندازه حرکتهای زاویه‌ای مداری و هم شامل سهمی از اندازه حرکت اسپینی است (در واقع همان $\mathbf{J}$ است) ضریب $\mathbf{g}$ ی لانده را محفوظ می‌داریم.

که در آن N تعداد اسپین به ازای واحد حجم است. اعمال این تقریب در معادلهٔ (۸-۱) به مقدار زیر برای ثابت بدون بعد λ در معادلهٔ (۸-۲) منجر می‌شود که میدان مولکولی موثر بر گشتاور i ام را تعیین می‌کند.

$$\lambda = \frac{2\sum_{i\neq j} J_{ij}}{N\mu_0\, g^2\, \mu_B^2} \qquad (۸\text{-}۴)$$

بنابراین λ با مجموع انرژیهای تبادل یک اسپین با تمامی دیگر اسپینهای موجود در جامد متناسب است. خواهیم دید که $\lambda >> 1$، نشان می‌دهد که برهم‌کنشهای الکتروستاتیکی به وجود آورندهٔ J_{ij} از برهم‌کنشهای مغناطیسی بین اتمها بسیار قوی‌تراند.

روش سیستماتیک تعویض عملگرهای اسپینی در هامیلتونی هایزنبرگ با مقادیر متوسط آنها برای به دست آوردن تقریب میدان مولکولی وایس عبارت است از درج روابط زیر

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_i &= \langle \mathbf{S} \rangle + (\mathbf{S}_i - \langle \mathbf{S} \rangle) \\ \mathbf{S}_j &= \langle \mathbf{S} \rangle + (\mathbf{S}_j - \langle \mathbf{S} \rangle) \end{aligned} \qquad (۸\text{-}۵)$$

در معادلهٔ (۸-۱) و چشم پوشی از جملهٔ $(\mathbf{S}_i - \langle \mathbf{S} \rangle)+(\mathbf{S}_j - \langle \mathbf{S} \rangle)$، که جملهٔ درجه دوم برحسب تفاوت بین عملگرها و مقدار متوسط آنهاست؛ توجه کنید که معادلات (۸-۵) اتحادهایی هستند و در نوشتن آنها هیچ تقریبی وارد نشده است . با دنبال کردن این روش، هامیلتونی به طور قابل ملاحظه‌ای ساده می‌شود، زیرا دیگر حاوی حاصل ضرب عملگرها، که محاسبات دقیق‌تر را بسیار مشکل می‌سازد، نیست. معادلهٔ (۸-۱) را به صورت زیر در می‌آید (در مورد جزئیات، مسئلهٔ ۸-۲ راببینید)

$$H \approx \frac{1}{2}\lambda\mu_0\,\mathbf{M}^2 - \sum_i \lambda\mu_0\,\vec{\mu}_i\cdot\mathbf{M} \qquad (۸\text{-}۶)$$

که در آن $\vec{\mu}_i = -g\mu_B\,\mathbf{S}_i$ عملگر متناظر باگشتاور مغناطیسی اتم است و λ با معادلهٔ (۸-۴) داده می‌شود. جملهٔ دوم در H نمایشگر برهم‌کنش $\vec{\mu}_i$ با میدان مولکولی وایس است.

تعویض اسپینها با مقادیر متوسط آنها به معنی آن است که از افت و خیزهای حول مقدار متوسط چشم پوشی شده است؛ این روش در مورد گذارهای فاز دیگر، علاوه بر گذار به حالت فرو مغناطیسی، نیز به کار می‌رود و عموماً **یک نظریهٔ میدان میانگین** نامیده می‌شود. برخی از شکستهای نظریهٔ میدان میانگین در مورد فرومغناطیس را بعداً بحث خواهیم کرد، ولی در حال حاضر توجه داریم که این مدل تقریبی است و به تحلیل آن ادامه می‌دهیم. خوشبختانه این مدل آنقدر ساده است که می‌توان یک جواب کامل به دست آورد.

۸-۳-۲ محاسبهٔ خواص فرومغناطیسی با استفاده از نظریه میدان میانگین

روش ما مشابه همان روشی است که برای پارامغناطیس در بخش ۷-۲ به کار بردیم با این تفاوت که میدان مغناطیسی واقعی $\mathbf{B}$ را با میدان مؤثر $\mathbf{B}_{eff}$ از معادلهٔ (۸-۲) تعویض می‌کنیم. بنابراین مغناطش با معادلهٔ (۷-۱۵) داده می‌شود. برای سادگی موردی را در نظر می‌گیریم که در آن گشتاور مغناطیسی واقع بر هر اتم ناشی از یک تک اسپین الکترون است، در نتیجه در معادلهٔ (۷-۱۵) $L=0$ ، $J=S=\frac{1}{2}$ ، $g=2$ قرار می‌دهیم که به صورت زیر درمی‌آید(مسئلهٔ ۷-۴ را ببینید)

$$M = N\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B B_{eff}}{k_B T}\right) \qquad (۸-۷)$$

نخست حد دمای بالا را بررسی می‌کنیم، $\mu_B B_{eff} / k_B T \ll 1$ ، که در آن تقریب $\tanh x \approx x$ را می‌توان به کار برد و معادلهٔ ۸-۷ را چنین نوشت

$$M = \frac{N\mu_B^2}{k_B T} B_{eff} = \frac{N\mu_B^2}{k_B T}(B_{loc} + \lambda\mu_\circ M) \qquad (۸-۸)$$

که در آن از معادلهٔ (۸-۲) برای B_{eff} استفاده شده است. در این حد M با B_{loc} متناسب است، بنابراین مغناطش خودبه خودی وجود ندارد. برای مشخص کردن پذیرفتاری پارامغناطیس حاصل باید B_{loc} را به میدان ماکروسکوپی $\mu_\circ H$ در ماده مربوط کنیم؛ از آنجا که این میدانها به اندازهٔ مقداری از مرتبهٔ $\mu_\circ M$ [1] با هم تفاوت دارند، این اختلاف را می‌توان در میدان مولکولی منظور کرد که در آنجا نیز توسط بر هم کنش تبادل کوچک می‌شود و در نتیجه از آن خواهیم کرد بنابراین با درج $\mu_\circ H$ به جای B_{loc} در معادلهٔ (۸-۸) و M چشم‌پوشی می‌توان با حل آن برای استفاده از معادلهٔ (۷-۱) پذیرفتاری را چنین تعیین کرد،

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{C}{T - T_c} \qquad (۸-۹)$$

۱- عموماً در مواد فرو مغناطیسی امکان ندارد از اختلافهای بین میدانهای متفاوت چشم پوشی کرده و رابطهٔ : میدان اعمالی $= \mathbf{B}_{loc} = \mu_\circ\mathbf{H}$ را اختیار کنیم. رابطهٔ بین این میدانها در پیوست (ب) مورد بحث قرار می‌گیرد. در آنجا نشان خواهیم داد که در نمونه‌های میله‌ای بلند که اغلب در آزمایشها به کار می‌روند $\mu_\circ\mathbf{H}$ است که با میدان اعمالی برابر می‌شود نه میدان ماکروسکپی $\mathbf{B}$، ($\mathbf{B}=\mu_\circ(\mathbf{H}+\mathbf{M})$ (معادلهٔ (۵ ب)). رابطهٔ $\mathbf{B}_{loc}$ با $\mu_\circ\mathbf{H}$ به ترتیب اتمهای درون ماده بستگی دارد؛ اگر این ترتیب کاتوره‌ای یا تقارن مکعبی داشته باشد، نتیجه می‌شود ($\mathbf{B}_{loc} = \mu_\circ(\mathbf{H}+\frac{\mathbf{M}}{3})$ (معادلهٔ (ب ۱۸). بنابراین در این مورد، درج $\mu_\circ H$ به جای $\mathbf{B}_{loc}$ در معادلهٔ (۸-۸) متناظر با افزودن $\frac{1}{3}$ به λ است؛ از آنجا که $\lambda >> 1$ است این تغییر مهم نیست.

که درآن

$$C = N\mu_0 \mu_B^2 / k_B \quad \text{و} \quad T_c = \lambda C \tag{۱۰-۸}$$

معادلهٔ (۸-۹) قانون تعدیل یافتهٔ کوری است (معادلهٔ (۷-۱۸))، که به **قانون کوری-وایس** معروف است و پذیرفتاری فلزات فرو مغناطیسی در دماهای بالا را به گونهٔ نسبتاً خوبی توصیف می‌کند. در $T = T_c$ پذیرفتاری واگرا می‌شود، و در زیر این دما فرض $\mu_B B_{loc} / k_B T \ll 1$ دیگر معتبر نیست. در ادامه نشان می‌دهیم که برای $T < T_c$ مغناطش خودبه خودی با مدل وایس پیش‌بینی می‌شود، به طوری که T_c نمایشگر دمای بالایی است که درآن دما ماده خواص فرومغناطیسی از خود نشان می‌دهد؛ این دما را **دمای کوری** می‌نامند. برای تخمین ثابت کوری C، قرار می‌دهیم $N = 9 \times 10^{28} m^{-3}$ (برای Fe) و به دست می‌آوریم، $C \approx 1K$. از آنجا که برای فرومغناطیسها T_c نوعاً $1000K$ است، نتیجه می‌گیریم که ثابت میدان مولکولی وایس $\lambda \sim 1000$. با استفاده از T_c امکان تخمین انرژی تبادل J نیز وجود دارد. اگر فرض کنیم که فقط نزدیکترین بر هم کنشهای تبادل مهم هستند، می‌توانیم $\sum J_{ij}$ در معادلهٔ (۸-۴) را با zJ تعویض کنیم، که در آن J برهم‌کنش تبادل نزدیکترین همسایه و z تعداد نزدیکترین همسایگان است. آنگاه با استفاده از معادلات (۸-۱۰) درمی‌یابیم که $J \approx 2k_B T_c / z$ مؤید فرض ما در آغاز این فصل است که وقتی انرژی گرمایی $k_B T$ از مرتبهٔ انرژی برهم کنش بین اسپینها باشد فرو مغناطیس ناپدید می‌شود. برای $T_c \approx 1000K$ و $z = 8$، داریم $J \approx 0/03\, eV$.

در دماهای کمتر از T_c، معادلهٔ (۸-۷) (با B_{eff} حاصل از معادلهٔ (۸-۲)) را نمی‌توان برای مغناطش به طور تحلیلی حل کرد؛ ولی راه حل ترسیمی ممکن است. می‌خواهیم نشان دهیم که در غیاب میدان اعمالی یک مغناطش غیر صفر وجود دارد. با قرار دادن $B_{loc} = 0$ [1] و وارد کردن مقیاس‌های مناسب بدون بعد برای مغناطش، $y = M / N\mu_B$، و میدان مؤثر $x = \mu_B B_{eff} / k_B T$، می‌توان معادلات (۸-۲) و (۸-۷) را به ترتیب به شکلهای زیر نوشت:

$$x = \frac{T_c}{T} y \tag{۱۱-۸}$$

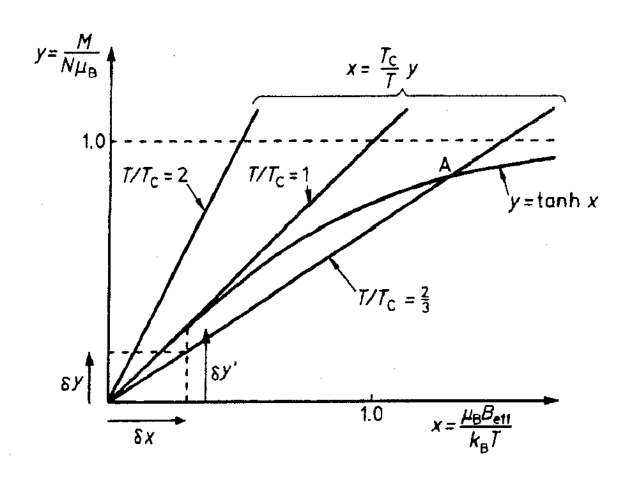
$$y = \tanh x \tag{۱۲-۸}$$

۱- وقتی مغناطش خودبه خودی وجود دارد، B_{loc} در میدان اعمالی صفر از بین نمی‌رود، ولی از مرتبهٔ $\mu_0 M$ است بنابراین جملهٔ B_{loc} در معادلهٔ (۸-۲) تصحیح کوچکی در میدان مولکولی وایس به عمل می‌آورد، درست همان گونه که در مورد اختلاف بین B_{loc} و $\mu_0 H$ در محاسبهٔ پذیرفتاری دمای- بالا عمل شد؛ در اینجا نیز، مانند آنجا، از این سهم چشم پوشی می‌کنیم.

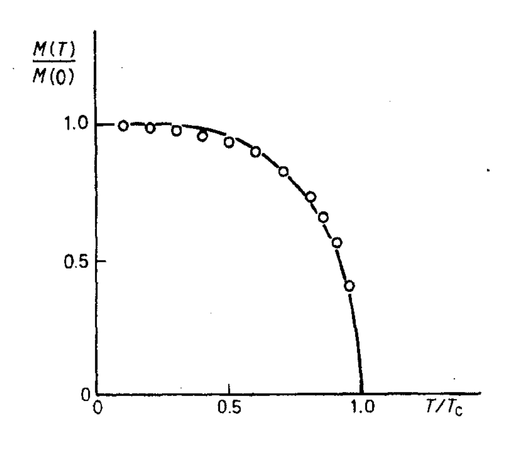
که در آن از معادلات (۸-۱۰) استفاده کرده‌ایم. جواب همزمان این معادلات با رسم هردو در یک نمودار به دست می‌آید، و این کار برای سه مقدار متفاوت T/T_c در شکل ۸-۲ انجام شده است. برای $T/T_c > ۱$ تنها محل تلاقی در مبداء است، که مربوط به مغناطش صفر است، $y = ۰$؛ این ناحیهٔ دمایی است که در آن طبق بحث فوق رفتار پارا مغناطیسی پیش‌بینی می‌شود. برای $T/T_c = ۱$ تنها محل تلاقی هنوز در مبداء است، ولی دراین حالت هر دو منحنی در محل تلاقی دارای شیب یکسان هستند. برای $T < T_c$ دو محل تلاقی وجود دارد، یکی در مبداء و یکی در نقطهٔ A.

همانطوری که استدلال زیر نشان می‌دهد، جواب در مبداء مربوط به تعادل ناپایدار است. فرض کنید که ، با یک افت و خیز، یک مغناطش کوچک مانند δy در شکل ۸-۲ پدیدار شود؛ این مغناطش یک میدان مؤثر که با معادلهٔ ۸-۱۱ داده می‌شود به بار می‌آورد، این میدان متوسط در شکل با δx نشان داده شده است . مغناطشی که توسط این میدان مؤثر به وجود می‌آید با معادلهٔ ۸-۱۲ بیان می‌شود و با $\delta y'$ نشان داده می‌شود؛ می‌بینیم که افت و خیز اولیه یک میدان مؤثر به وجود می‌آورد که حتی مغناطش بزرگتری را تولید می‌کند. لذا این افت و خیز رشد می‌کند و جواب $y = ۰$ برای $T < T_c$ ناپایدار است. استدلال مشابهی را می‌توان، برای نشان دادن اینکه نقطهٔ A نمایشگر یک جواب پایدار است، ارائه کرد.

مغناطش خودبه خودی نشان داده شده بانقطهٔ A از صفر در T_c تا مقدار اشباعی $N\mu_B$ در $T = ۰$ افزایش‌می‌یابد. شکل ۸-۳ وابستگی دمایی مغناطش خودبه خودی نیکل را با مقدار



شکل ۸-۲ حل ترسیمی معادلات (۸-۱۱) و (۸-۱۲). این شکل همچنین نشان می‌دهد که برای $T < T_c$ جواب معادلات در مبداء ناپایدار است.



شکل ۸-۳ : مغناطش خودبه خودی یک فرومغناطیس نسبت به مقدار آن در $T=0$ به صورت تابعی از T/T_c. منحنی پر نتیجهٔ نظری میدان متوسط برای $J=S=\frac{1}{2}$ است که از حل معادله‌های (۸-۱۱) و (۸-۱۲) به دست می‌آید. دایره‌ها مقایر تجربی مربوط به Ni را می‌دهند که از کتاب زیر اقتباس شده‌اند.
American Institute of physics Hondbook, 3rd edn, McGrow-Hill, NewYork (1972)

پیش‌بینی شدهٔ نظری آن مقایسه می‌کند؛ با وجودی که توافق کیفی وجود دارد، تفاوتهای کوچک ولی مهمی نیز وجود دارند که در ادامه بیشتر بحث می‌کنیم. در جدول ۸-۱ مقادیر اشباعی مغناطش خودبه خودی برای فلزات فرومغناطیسی گوناگون با مقادیر پیش‌بینی شده، با فرض اینکه گشتاور واقع بر هر یون با قاعدهٔ هوند قابل پیش‌بینی باشد، مقایسه می‌شوند. توافق خوبی برای فرومغناطیسهای خاکی کمیاب Gd و Dy به دست آمده است ولی برای فلزات واسط Fe، Ni و Co سازگاری ضعیف است. بر خلاف وضعیت مربوط به نمکهای پارامغناطیسی فلزات واسط، این توافق برای خود فلزات واسط، با فرض اینکه اندازه حرکت زاویه‌ای مداری فرونشانده شود، نیز اصلاح نمی‌شود.

جدول ۸-۱ : خواص مواد فرومغناطیسی

ماده	$T_c(K)$	مغناطش خود به خودی (μ_B به ازای هر اتم) در $T=0$	نظریه gJ	نظریه ۲S	نماهای بحرانی γ	نماهای بحرانی β
			Fe^{3+} ۵	۵		
Fe	۱۰۴۳	۲/۲۲			۱/۳۳± ۰/۰۲	۰/۳۴± ۰/۰۴
			Fe^{2+} ۶	۴		
Co	۱۳۸۸	۱/۷۲	۶	۳	۱/۲۱± ۰/۰۴	–
Ni	۶۲۷	۰/۶۱	۵	۲	۱/۳۵± ۰/۰۲	۰/۴۲±۰/۰۷
Gd	۲۹۲	۷/۶۳	۷	–	۱/۳۰ ± ۰/۱۰	–
Dy	۸۸	۱۰/۲	۱۰	–	–	–
EuO	۶۹	۶/۸	۷	–	۱/۳۰ ± ۰/۰۱	۰/۳۶ ± ۰/۰۱

(داده‌ها از کتیل گرفته شده‌اند[۷])

همانطور که قبلاً در بخش ۴-۲-۷ نشان داده‌ایم، الکترونهای $3d$ در این فلزات را می‌توان چنین توصیف کرد که به جای اینکه بر روی اتمها جاگزیده شده باشند، یک نوار از حالتهای الکترونی متحرک را اشغال کرده‌اند. نظریهٔ میدان میانگین را می‌توان طوری گسترش داد که این وضعیت را نیز شامل شود. این وضعیت مغناطش خودبه خودی به این دلیل بروز می‌کند که میدان مولکولی باعث جابه جایی نسبی نوارهای اسپینهای بالا و پایین مانند آنچه که در شکل ۸-۴ نشان داده شده است می‌شود. این شکل همچنین توضیح می‌دهد که چگونه در چنین مدلی یک مغناطش اشباعی ۲/۲ مگنتون بور برای آهن تولید می‌شود. تأیید اینکه مغناطش خودبه خودی آهن به اسپین الکترون وابسته است **از آزمایش انیشتن - دوهاس** نتیجه می‌شود، که در آن اندازه حرکت زاویه‌ای که به صورت ضربه‌ای در یک میلهٔ آهنی هنگامی که به ناگهان مغناطیده می‌شود به وجود می‌آید اندازه‌گیری می‌شود؛ نسبت اندازه حرکت زاویه‌ای به گشتاور مغناطیسی متناظر با یک ضریب لاندهٔ $g=2$ است.

در حدهای T درست اندکی کمتر از T_c و T نزدیک به صفر جوابهای تحلیلی تقریبی معادلات (۸-۱۱) و (۸-۱۲) را می‌توان به دست آورد. در نزدیکی T_c ، x کوچک است و می‌توانیم از $\tanh x \approx x - x^3/3$ استفاده کنیم؛ با محاسبهٔ y، از این معادلات به دست می‌آوریم

$$M = N\mu_B y \approx \sqrt{3}\ N\mu_B \frac{T}{T_c}\left(1-\frac{T}{T_c}\right)^{1/2} \tag{۸-۱۳}$$

که نشانگر آن است که وقتی دما از پایین به دمای کوری میل می‌کند M به شکل $(1-T/T_c)^{1/2}$ به صفر می‌گراید. درنزدیکی $T=0$، x بزرگ است و $\tanh x \approx 1 - 2\exp(-2x)$. درنتیجه، بااستفاده از معادلات (۸-۱۱) و (۸-۱۲) داریم.

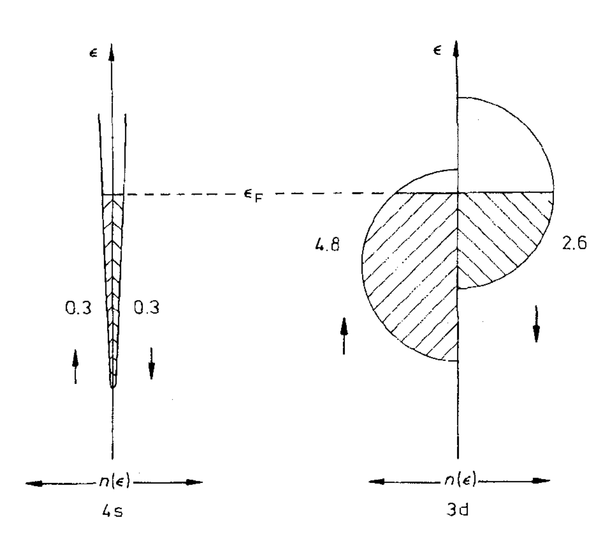
$$y \approx \left[1-2\exp\left(-\frac{2T_c}{T}\, y\right)\right]$$

یا

$$M \approx N\mu_B\left[1-2\exp\left(\frac{-2T_c}{T}\right)\right] \tag{۸-۱۴}$$

که در آن $y=1$ را در جملهٔ دوم داخل کروشه‌ها قرار داده‌ایم، این عبارت، تصحیح کوچکی در همخط شدگی کامل گشتاورها ایجاد می‌کند.

باوجودی که نظریهٔ میدان میانگین رفتار کیفی فرومغناطیسها را به درستی توصیف می‌کند، ولی وابستگیهای دمایی پیش بینی شده توسط معادلات (۸-۹) و (۸-۱۳) به طور تجربی مشاهده نشده‌اند. دلیل این اختلاف در نزدیکی $T=0$ در قسمت ۸-۵ بحث می‌شود. عدم



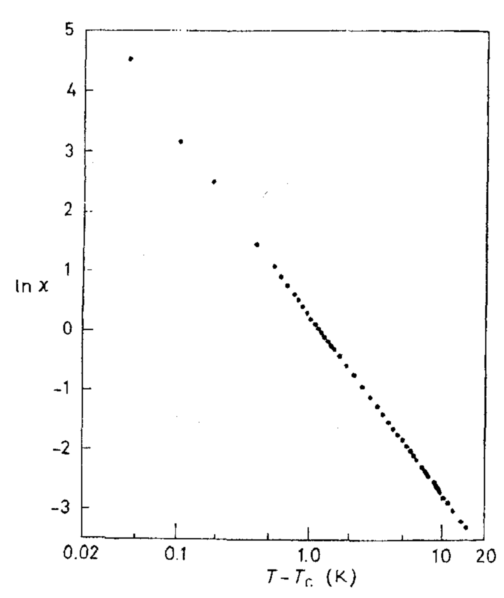
شکل ۸-۴: تصویر نواری ساده شدهٔ فرومغناطیس در آهن. پیکانهای عمودی نمایشگر جهتهای اسپین و اعداد نشانگر تقسیم هشت الکترون $3d$ و $4s$ هر اتم بین نوارهای انرژی $3d$ و $4s$ هستند. از قطبش کوچک ممکن در نوار $4s$ در ترسیم شکل چشم‌پوشی شده است؛ الکترونهای $4s$ احتمالاً از طریق سازوکار غیر مستقیم شکل ۸-۱ در برهم کنش تبادل بین الکترونهای $3d$ مشارکت دارند.

موفقیت نظریهٔ میدان میانگین در نزدیکی T_c در مورد تمام گذارهای فاز[1] رتبهٔ دوم رایج است. این عدم موفقیت به دلیل وجود افت و خیزهای بزرگ ترمودینامیکی در خواص دستگاه (موسوم **به افت و خیزهای بحرانی**) حول مقادیر متوسط آنها رخ می‌دهد؛ در دستگاههای مغناطیسی افت و خیزهای گشتاور دو قطبی اتمی به این معنی است که دیگر تعویض گشتاور با مقدار متوسط آن تقریب مناسبی نیست.

افت و خیزهای بحرانی بر رفتار پذیرفتاری درست در بالای T_c و بر مغناطش خودبه خودی درست در زیر T_c غالب است. پذیرفتاری آهن به صورت تابعی از $T - T_c$ در شکل ۸-۵ نشان داده شده است؛ از آنجا که مقیاس برروی هر دو محور لگاریتمی است، **رفتار بحرانی** پذیرفتاری توسط وابستگی دمایی زیر

$$\chi \propto (T - T_c)^{-\gamma}$$

۱- گذار مرتبهٔ دوم گذاری است که در آن هیچ ناپیوستگی در آنتروپی رخ نمی‌دهد و بنابراین گرمای نهان وجود ندارد (مسئلهٔ ۸-۲ را ببینید). گذار ابر رسانایی در غیاب میدان مغناطیسی و گذار مایع-گاز در دمای بحرانی (ولی نه در دماهای پایین‌تر) مثالهای دیگری از گذار مرتبهٔ فاز دوم‌اند.



شکل ۸-۵ پذیرفتاری آهن (شامل ۰/۱۶ درصد اتمی ناخالصی تنگستن) که به صورت تابعی از $T - T_c$ با مقیاس لگاریتمی بر روی هر دو محور ترسیم شده است. خط مستقیم حاصل از این داده‌ها نشانگر رابطه‌ای به شکل $\chi = (T - T_c)^{-۱/۳۳}$ است.
این نمودار با اجازه از منبع زیر اقتباس شده است:
J.E. Noakes N.E. Tornberg and A. Arrott, J. Appl. Phys. **37**, *1264 (1966)*

با نمای بحرانی $\gamma =$ ۱/۳۳ توصیف می‌شود. مغناطش خودبه خودی در زیر T_c چنین تغییر می‌کند.

$$M \propto (T - T_c)^{\beta}$$

که در آن β نمای بحرانی دیگری است. مقادیر اندازه گیری شدهٔ γ و β برای فرومغناطیسهای گوناگون در جدول ۸-۱ داده شده‌اند. برای تمام مواد مقادیر مشابهی $\gamma(\approx$ ۱/۳۵$)$ و $\beta(\approx$ ۰/۳۵$)$ به دست آمده‌اند؛ پیش‌بینیهای میدان میانگین عبارتند از $\gamma =$ ۱ (معادلهٔ (۸-۹)) و $\beta =$ ۰/۵ (معادلهٔ (۸-۱۳)).

کاوش در رفتار بحرانی موضوع پژوهشهای وسیعی بوده‌است و یک نتیجهٔ مهم آن است که نماهای بحرانی برای گذارهای فاز مرتبهٔ دوم فقط به طبیعت تغییر تقارن موجود بستگی دارند. بنابراین نماهای بحرانی یک گذار پارامغناطیس- فرو مغناطیس که توسط هامیلتونی هایزنبرگ توصیف شده است با این حقیقت تعیین می‌شوند که فاز پارا مغناطیسی همسانگرد به فازی تغییر می‌کند که در آن جهت خاصی وجود دارد، که جهت مغناطش خودبه خودی است، حالت فرو مغناطیسی، بر خلاف حالت پارامغناطیسی، ناوردای دورانی نیست. به هر حال توجه کنید که تمامی حالتهای مختلف فرومغناطیسی که از نظر فیزیکی متفاوت‌اند و توسط دوران مغناطش خودبه خودی تولید می‌شوند باید دارای انرژی یکسان باشند. زیرا هامیلتونی‌هانیزبرگ خود ناوردای دورانی است.

برای تکمیل بحث دربارهٔ نظریهٔ میدان میانگین وایس فرومغناطیس خاطر نشان می سازیم که به نظر می‌رسد این نظریه یک منحنی مغناطش پسماندی برحسب میدان اعمالی را پیش‌بینی

می‌کند که از نظر کیفی مشابه منحنی مشاهده شده در ذرات فرو مغناطیسی شامل یک تک حوزه است. (بخش ۸-۷ در مورد توضیح حوزه‌ها ببینید) پس از اینکه ذره توسط میدانی، در همان جهت میدان مغناطیده شود، فقط وقتی میدان در جهت معکوس از یک مقدار بحرانی معین فزونی یابد مغناطش تغییر علامت می‌دهد. پسماند در این مدل پیامدی است از محدودیت در جهت z ماندن مغناطش. در غیاب میدان خارجی چیزی در این مدل وجود ندارد که جهت خاصی برای مغناطش مشخص کند، بنابراین مغناطش به آزادی می‌چرخد و با صفر شدن میدان جهتش معکوس می‌شود. در یک بلور واقعی یک جهت ترجیحی برای مغناطش وجود دارد که برای مثال به میدانهای الکتروستاتیکی اتمهای همسایه مربوط می‌شود؛ منحنی پسماند فرومغناطیسهای تک حوزه‌ای از این نا همسانگردی بلورین نتیجه می‌شود.

۸-۴ مدل نیل در مورد پاد فرو مغناطیس

اگر انرژی تبادل J_{ij} بین نزدیکترین همسایگان د رمعادلهٔ (۸-۱) منفی باشد همراستایی پادموازی اسپینهای آنها ترجیح داده می‌شود. در این مورد تمایلی برای نظم‌گیری در حالتی وجود دارد که در آن اسپینها درون ساختار به طور یک در میان قرار می‌گیرند و در میدان اعمالی صفر، مغناطش ماکروسکوپی وجود ندارد. شبکهٔ اتمهای مغناطیسی به دو زیر شبکهٔ یکسان، A و B، تقسیم می‌شوند، به طوری که در حالت منظم گشتاور مغناطیسی میانگین در جایگاههای زیر شبکهٔ A با گشتاورهای مغناطیسی میانگین در زیر شبکه B پاد موازی است. اگر شبکه اصلی مکعبی ساده باشد یک نحوهٔ تقسیم بدیهی وجود دارد که در آن جایگاههای Aو B جایگاههای Na و Cl در ساختار $NaCl$ [1] هستند. همچنین یک تقسیم بدیهی برای شبکهٔ bcc وجود دارد که در آن جایگاههای مرکز حجمی یک زیر شبکه و جایگاههای گوشه‌ای زیر شبکهٔ دیگر را تشکیل می‌دهند[2] در این دو مورد نزدیکترین همسایگان هر جایگاه B جایگاههای A اند و برعکس. یک شبکهٔ fcc نمی‌تواند به دو زیر شبکه با این خاصیت تقسیم شود. (مسئلهٔ ۸-۴ را ببینید).

نیل رهیافت میدان مولکولی وایس در مورد پاد فرومغناطیس را، با فرض اینکه اتمهای واقع بر یک زیر شبکه، میدان مولکولی متناسب و در جهت مخالف با مغناطش زیر شبکهٔ دیگر را

۱- باید در تمایز یاختهٔ یکهٔ شیمیایی (یاخته مکعبی سادهٔ اصلی) از یاختهٔ یکهٔ مغناطیسی (یاختهٔ یکهٔ fcc مربوط به ساختار **NaCl**) دقت کنیم؛ از آنجا که اسپینهای ↑ و ↓ سطح مقطعهای پراکندگی متفاوت برای نوترونی، با اسپین ↑ دارند، امکان استنتاج یاختهٔ یکهٔ مغناطیسی از آزمایشهای پراش نوترون و لذا تعیین ساختارهای پاد فرومغناطیسی وجود دارد (بخش ۱۲-۵-۱ را ببینید).

۲- ولی توجه کنید که در ^3He ی جامد bcc ، ترتیب پادفرومغناطیسی گشتاورهای هسته‌ای که برای $T<1mK$ رخ می‌دهد به این تقسیم بندی "بدیهی" مربوط نمی‌شود.

تجربه می‌کنند، تعمیم داد. بنابراین به جای معادلهٔ (۸-۲) میدانهای مؤثر برای دو زیر شبکه را به صورت زیر می‌نویسیم

$$B^{A}_{eff} = \mu_0 (\mathbf{H} - \lambda \mathbf{M}_B) \qquad B^{B}_{eff} = \mu_0 (\mathbf{H} - \lambda \mathbf{M}_A) \qquad (۱۵\text{-}۸)$$

که در آن $\mathbf{M}_A$ و $\mathbf{M}_B$ سهمهای هر زیر شبکه در مغناطش کل هستند، $\mathbf{M} = \mathbf{M}_A + \mathbf{M}_B$ در اینجا همانند بخش قبل فرض می‌کنیم که تفاوت بین میدان موضعی $\mathbf{B}_{loc}$ و میدان ماکروسکوپی $\mu_0 \mathbf{H}$ را می‌توان به صورت تصحیح‌های جزیی در میدانهای مولکولی ترکیب کرد. همچنین می‌توان جفت شدگی زیر شبکه با خودش را در این مدل به حساب آورد؛ این کار بدون آنکه نتایج کیفی عمده راتغییر دهد، بر پیچیدگیها می‌افزاید لذا چنین نمی‌کنیم (مسئلهٔ ۸-۴ را ببینید).

با استفاده از هامیلتونی هایزنبرگ و با فرض اینکه فقط برهم کنشهای نزدیکترین همسایه مهم‌اند و اینکه نزدیکترین همسایه‌های هریک ازگشتاورهای A از زیر شبکهٔ B باشند، معادلات (۸-۱۵) را می‌توان به دست آورد. با شگردی همانند آنکه در مورد فرومغناطیس به کار رفت ثابت λ ی میدان مولکولی در معادلات (۸-۱۵) به صورت زیر مشخص می‌شود

$$\lambda = -\frac{۴\sum_{j\neq i} J_{ij}}{N\mu_0 g^۲ \mu_B^۲} = \frac{-۴zJ}{N\mu_0 g^۲ \mu_B^۲} \qquad (۱۶\text{-}۸)$$

که در آن J انرژی تبادل نزدیکترین همسایه و z تعداد نزدیکترین همسایگان است. توجه کنید که، چون J منفی است، λ مثبت است؛معادلهٔ (۸-۱۶) در مقایسه با معادلهٔ (۸-۴) به اندازهٔ یک ضریب ۲ اختلاف دارد زیرا هر زیر شبکه فقط دارای $N/۲$ اتم است.

همانند مورد فرومغناطیس، برای سهولت به مورد $g=۲$ و $S=J=\frac{۱}{۲}$ می‌پردازیم. در نتیجه مغناطش زیر شبکه‌ها همان‌طوری که توسط معادلهٔ (۸-۷) بیان شده است، عبارتند از

$$M_A = \frac{N}{۲}\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B B^{A}_{eff}}{k_B T}\right) \qquad M_B = \frac{N}{۲}\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B B^{B}_{eff}}{k_B T}\right) \qquad (۱۷\text{-}۸)$$

در دماهای بالا، مانند قبل می‌توان تقریب $\tanh x \approx x$ را به کاربرد و میدانهای مؤثر را از معادلات (۸-۱۵) درج کرد تا پس از مرتب ساختن چنین حاصل شود.

$$M_A + \frac{\lambda C}{۲T} M_B = \frac{C}{۲T} H \qquad \frac{\lambda C}{۲T} M_A + M_B = \frac{C}{۲T} H \qquad (۱۸\text{-}۸)$$

که در آن $C = N\mu_0 \mu_B^۲ / k_B$ ثابت کوری است (معادلهٔ (۸-۱۰) راببینید) با حل معادلات

(۸-۱۸) مغناطش زیر را به دست می‌آوریم

$$M = M_A + M_B = \frac{C}{T + \lambda C/۲} \; H$$

که متناظر است با پذیرفتاری

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{C}{T + T_N} \quad (۸\text{-}۱۹)$$

که درآن $T_N = \lambda C/۲$. بنابراین پذیرفتاری به کمتر از مقدار قانون کوری، معادلهٔ (۷-۱۸) کاهش می‌یابد (شکل ۸-۶ را ببینید) و در تمام دماها متناهی باقی می‌ماند.

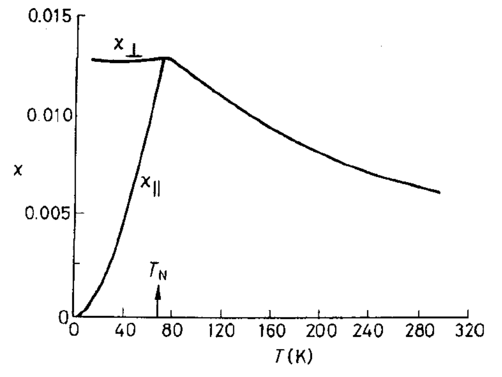
آستانه نظم‌گیری مغناطیسی در دمایی رخ می‌دهد که در آن معادلات (۸-۱۸) درغیاب میدان اعمالی دارای یک جواب غیر صفر باشد. این ایجاب می‌کند که دترمینان ضرایب در طرف چپ این معادلات صفر شود و لذا

$$۱ - \lambda^۲ C^۲ / ۴T^۲ = ۰$$

یا

$$T = \lambda C / ۲ = T_N \quad (۸\text{-}۲۰)$$

لذا دمای آستانه برای پاد فرومغناطیس، مشهور به **دمای نیل**، برابر با دمایی است که در قانون تعدیل یافتهٔ کوری برای پذیرفتاری ظاهر می‌شود (معادلهٔ ۸-۱۹)؛ این ویژگی در مدلهای پیشرفته‌تر یا در مواد پاد فرومغناطیسی واقعی وجود ندارد. با درج معادلهٔ (۸-۲۰) در معادلات (۸-۱۹) برای دستیابی به اینکه جواب غیر صفر برای $H = ۰$ دارای خاصیت $M_A = -M_B$ است، شکل‌گیری یک حالت پادفرومغناطیسی تأیید می‌شود. برای دماهای زیر T_N ،



شکل ۸-۶: پذیرفتاری مغناطیسی پادفرومغناطیس $MnF_۲$. پذیرفتاری‌های $\chi_\perp$ و $\chi_\parallel$ که در زیر دمای نیل $۶۷K$ اندازه‌گیری شده‌اند به ترتیب متناظراند، با میدانهای اعمالی موازی و عمود بر مغناطش خود به خودی زیر شبکه‌ها.

معادلات (۸-۱۵) و (۸-۱۷) کماکان دارای یک جواب پادفرومغناطیسی با $M_A = -M_B$ در میدان اعمالی صفر هستند؛ مغناطش خودبه‌خودی زیر شبکهٔ A رابطهٔ زیر را ارضاء می‌کند

$$M_A = \frac{N}{۲}\, \mu_B \; tanh \left(\frac{T_N}{T} \frac{۲M_A}{N\mu_B} \right) \qquad (۸\text{-}۲۱)$$

که اصولاً همان معادله‌ای است که مغناطش خود به خودی یک فرومغناطیس را می‌دهد (این معادله از ترکیب معادلات (۸-۱۱) و (۸-۱۲) به دست می‌آید).

چون مغناطش کل $(M_A + M_B)$ در میدان صفر از بین می‌رود بازهم می‌توانیم برای پادفرومغناطیس در حالت منظمش یک پذیرفتاری تعریف کنیم. پذیرفتاری اندازه‌گیری شده به صورت تابعی از دما در شکل ۸-۶ نشان داده شده‌است. در زیر T_N، بسته به اینکه میدان خارجی موازی یا عمود بر مغناطش خودبه خودی زیر شبکه‌هاباشد[1]، دو مقدار برای پذیرفتاری وجود دارد (مسئلهٔ ۸-۵ را ببینید) ولی رفتار مشاهده شده از نظر کیفی منطقی است. وقتی میدان بر مغناطش زیر شبکه‌ها عمود باشد، همانطورکه در شکل ۸-۷ نشان داده شده است، اسپینها نسبتاً به آسانی کج می‌شوند تا مطابق شکل ۸-۶ مغناطش موازی با میدان همراه با پذیرفتاری تقریباً ثابت $\chi_\perp$ را به بار می‌آورند. مغناطش ناشی از میدان موازی مغناطش زیر شبکه‌ها در مقابل میدان مولکولی کل قرار می‌گیرد و در $T = ۰$ که هردو زیر شبکه کاملاً همخط شده‌اند، تا مرتبهٔ اول برحسب میدان اعمالی، هرگز رخ نمی‌دهد. فقط در نزدیکی T_N است که میدان مولکولی ضعیف می‌شود و دو پذیرفتاری قابل مقایسه می‌شوند.

۸-۵ امواج اسپینی

۸-۵-۱ فرومغناطیسها در دمای پایین

نظریهٔ میدان میانگین فرومغناطیس در دماهای پایین با شکست روبرو می‌شود زیرا این نظریه حالتهای برانگیختهٔ با انرژی پایین را به درستی پیش‌بینی نمی‌کند. برای مشاهده این موضوع،

H

شکل ۸-۷: مغناطش یک پادفرومغناطیس در جهت عمود بر مغناطش خودبه خودی زیر شبکه‌ها مطابق شکل توسط کج شدگی مختصر گشتاورهای اتمی حاصل می‌شود.

۱- باید تصور کنیم که جهت مغناطش زیر شبکه‌ها توسط میدانهای الکتروستاتیکی درون بلور تعیین می‌شود، در نتیجه در اثر اعمال یک میدان مغناطیسی ضعیف تغییر نمی‌کند.

مطابق شکل ۸-۸ (الف) زنجیر یک بعدی از اسپینها که به طور فرومغناطیسی همخط شده‌اند را در نظر بگیرید. اگر اسپین واقع در یک انتهای زنجیر به اندازه °۳۶۰ دوران کند، دیگر اسپینها، برای کمینه ساختن انرژی تبادل، به ترتیبی که در شکل ۸-۸ (ب) نشان داده شده است ، قرار می‌گیرند. این یک حالت برانگیختهٔ با انرژی پایین است زیرا در ساختار حاصل، اسپینهای همسایه تقریباً به طور کامل موازیند، در نتیجه انرژی تبادل بسیار اندکی تلف می‌شود. ولی نظریهٔ میدان میانگین یک انرژی بسیار بالایی به این حالت نسبت می‌دهد زیرا مغناطش **متوسط** و لذا میدان مولکولی از بین می‌رود. نکته مهم این است که انرژی یک اسپین باید به سمتگیری اسپینهای دیگر در همسایگی آن بستگی داشته باشد و نه به مغناطش میانگین نمونه.

۸-۵-۲ امواج اسپینی در بلور یک بعدی

با فرض اینکه اسپینها مانند اندازه حرکتهای زاویه‌ای کلاسیکی رفتار می‌کنند[1]، حالتهای برانگیختهٔ باانرژی پایین زنجیر اسپینهای همخط شکل ۸-۸(الف) را محاسبه می‌کنیم. روش

(الف) زنجیری از اسپین‌های کاملاً همخط.

(ب) حالت برانگیختهٔ با انرژی پایین زنجیر که نظریهٔ میدان میانگین به غلط انرژی بالایی به آن نسبت می‌دهد. در بلورهای واقعی ناهمسانگردی بلورین یک جهت "آسان" برای مغناطش فراهم می‌سازد و همانند محاسبهٔ ما در مورد موج اسپینی در قسمت ۸-۵-۲، حالتهای برانگیختهٔ با پایین‌ترین انرژی متناظر با انحرافهای کوچک اسپینها از این جهت ترجیح داده شده‌اند. به دلیل ناهمسانگردی بلورین، بسامد موج اسپینی در حد طول موج نامتناهی به یک مقدار متناهی می‌گراید (مسئلهٔ ۸-۶ را ببینید).

شکل ۸-۸

۱- ترسیم شکلهایی چون ۸-۸ براساس یک رهیافت کلاسیکی صورت می‌گیرند، زیرا مشخص کردن دقیق سمتگیری یک اسپین با اصل عدم قطعیت در تناقض است.

محاسبه شبیه روشی است که برای محاسبهٔ ارتعاشات شبکه‌ای زنجیر در فصل ۲ به کار رفت. برای سهولت فقط برهم‌کنشهای تبادل نزدیکترین همسایه را بررسی می‌کنیم. در نتیجه، با استفاده از معادلهٔ (۸-۱)، انرژی تبادل اسپین nام در این زنجیر برابر است با

$$E_n = -2J\ \mathbf{S}_n \cdot (\mathbf{S}_{n-1} + \mathbf{S}_{n+1}) \qquad (۸\text{-}۲۲)$$

که در آن $2J$ برهم‌کنش تبادل نزدیکترین همسایه است. چون گشتاور مغناطیسی $\vec{\mu}_n$ اسپین n برابر با $-g\mu_B\ \mathbf{S}_n$ است، E_n را می‌توان به شکل $-\vec{\mu}_n \cdot \mathbf{B}_n$ نوشت، که درآن

$$\mathbf{B}_n = -\frac{2J}{g\,\mu_B}\ (\mathbf{S}_{n-1} + \mathbf{S}_{n+1}) \qquad (۸\text{-}۲۳)$$

میدان موثر ناشی از برهم کنش تبادلی است که بر اتم nام اثر می‌کند. معادلهٔ حرکت اسپین nام با مساوی قراردادن آهنگ تغییر اندازه حرکت زاویه‌ای $\hbar d\,\mathbf{S}_n / dt$ با گشتاور نیروی ناشی از میدان، $\vec{\mu}_n \times \mathbf{B}_n$، به دست می‌آید. بنابراین

$$\hbar\frac{d\mathbf{S}_n}{dt} = \vec{\mu}_n \times \mathbf{B}_n = 2J\ \mathbf{S}_n \times (\mathbf{S}_{n-1} + \mathbf{S}_{n+1}) \qquad (۸\text{-}۲۴)$$

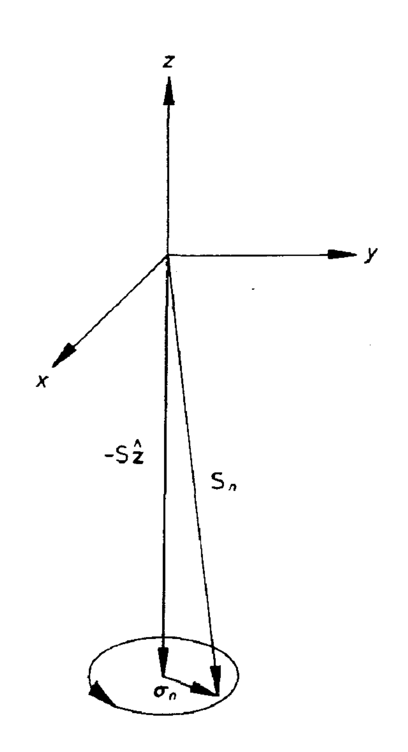
معادلات (۸-۲۴) بر حسب اسپینها غیر خطی‌اند و بنابراین حل آنها بدون تقریب مشکل است. از آنجا که حالتهای برانگیختهٔ با انرژی پایین مورد توجه است، می‌توانیم این معادلات را با نوشتن

$$\mathbf{S}_n = -S\ \hat{\mathbf{z}} + \vec{\sigma}_n \qquad (۸\text{-}۲۵)$$

خطی کنیم، که در آن $-S\ \hat{\mathbf{z}}$ مقدار **ثابت** $\mathbf{S}_n$ (و تمام اسپینهای دیگر) در حالت همخطی کامل و $\vec{\sigma}_n$ بردار کوچکی در صفحهٔ xy است که نمایشگر انحراف اسپین nام از همخطی کامل است [1]. این وضعیت در شکل ۸-۹ نشان داده شده است. توجه کنید که نیازی نیست که جهت مغناطش $\hat{\mathbf{z}}$ رابطهٔ خاصی با جهت زنجیر داشته باشد. با درج معادلهٔ (۸-۲۵) در معادلهٔ (۸-۲۴) و نگهداشتن تنها جمله‌های مرتبهٔ اول برحسب $\vec{\sigma}_n$ چنین حاصل می‌شود

$$\begin{aligned}\hbar\frac{d\,\vec{\sigma}_n}{dt} &= -2J\ S\,\hat{\mathbf{z}} \times (\vec{\sigma}_{n-1} + \vec{\sigma}_{n+1}) - 4J\,S\vec{\sigma}_n \times \hat{\mathbf{z}} \\ &= -2J\ S\ \hat{\mathbf{z}}\ \times (\vec{\sigma}_{n-1} - 2\vec{\sigma}_n + \vec{\sigma}_{n+1})\end{aligned} \qquad (۸\text{-}۲۶)$$

۱- این شرط که $\vec{\sigma}_n$ عمود بر $\hat{\mathbf{z}}$ است از دربایست ثابت ماندن $|\mathbf{S}_n|^2$ و برابر با $\mathbf{S}^2$ ماندن آن حاصل می‌شود؛ با در نظر گرفتن تقریب مرتبهٔ اول، این شرط ایجاب می‌کند که $S\hat{\mathbf{z}} \cdot \vec{\sigma}_n = 0$. اسپینها را همخط با امتداد $-\hat{\mathbf{z}}$ اختیار می‌کنیم زیرا این متناظر با یک مغناطش در امتداد $+\hat{\mathbf{z}}$ است.



شکل ۸-۹ حرکت تقدیمی یک تک اسپین در یک موج اسپینی کلاسیکی.

شکل مولفه‌های معادلهٔ (۸-۲۶) به صورت زیر درمی‌آید

$$\hbar \left(\frac{d\sigma_n}{dt}\right)_x = 2JS\,(\sigma_{n-1} - 2\sigma_n + \sigma_{n+1})_y$$
$$\hbar \left(\frac{d\sigma_n}{dt}\right)_y = -2JS\,(\sigma_{n-1} - 2\sigma_n + \sigma_{n+1})_x \qquad (۸-۲۷)$$

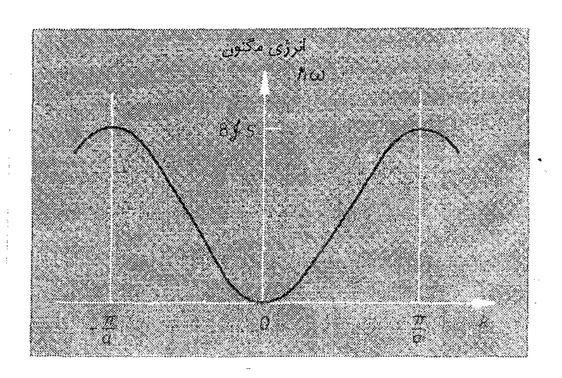
اگر معادلهٔ نخست را در i ضرب و با معادلهٔ دوم جمع کنیم تک معادلهٔ زیر را به دست می‌آوریم.

$$i\hbar \frac{d\sigma_n^-}{dt} = -2JS\,(\sigma_{n-1}^- - 2\sigma_n^- + \sigma_{n+1}^-) \qquad (۸-۲۸)$$

برای متغیر مختلط

$$\sigma_n^- = \sigma_{nx} - i\,\sigma_{ny} \qquad (۸-۲۹)$$

معادلات (۸-۲۸) از نظر شکل شباهت زیادی با معادلات (۲-۷) و (۴-۹) دارند، که به ترتیب ارتعاشات شبکه و حالتهای الکترونی در زنجیر یک بعدی را توصیف‌می‌کنند؛



شکل ۸-۱۰ رابطهٔ پاشندگی برای امواج اسپینی در یک فرومغناطیس یک بعدی. منطقهٔ اول بریلوئن، $-\pi/a<k<\pi/a$ ، تمام جوابهای متمایز فیزیکی را در بردارد.

معادلات (۸-۲۸) نیز مانند آن معادلات دارای جواب موج گونه‌اند. اگر قرار دهیم

$$\sigma_{\bar{n}} = Ae^{i\,(kna - \omega t)} \qquad (۸\text{-}۳۰)$$

که در آن a فاصله شبکه است، آنگاه ، با حذف یک عامل $Aexp\ [i\,(kna-\omega t)]$، به دست می‌آوریم

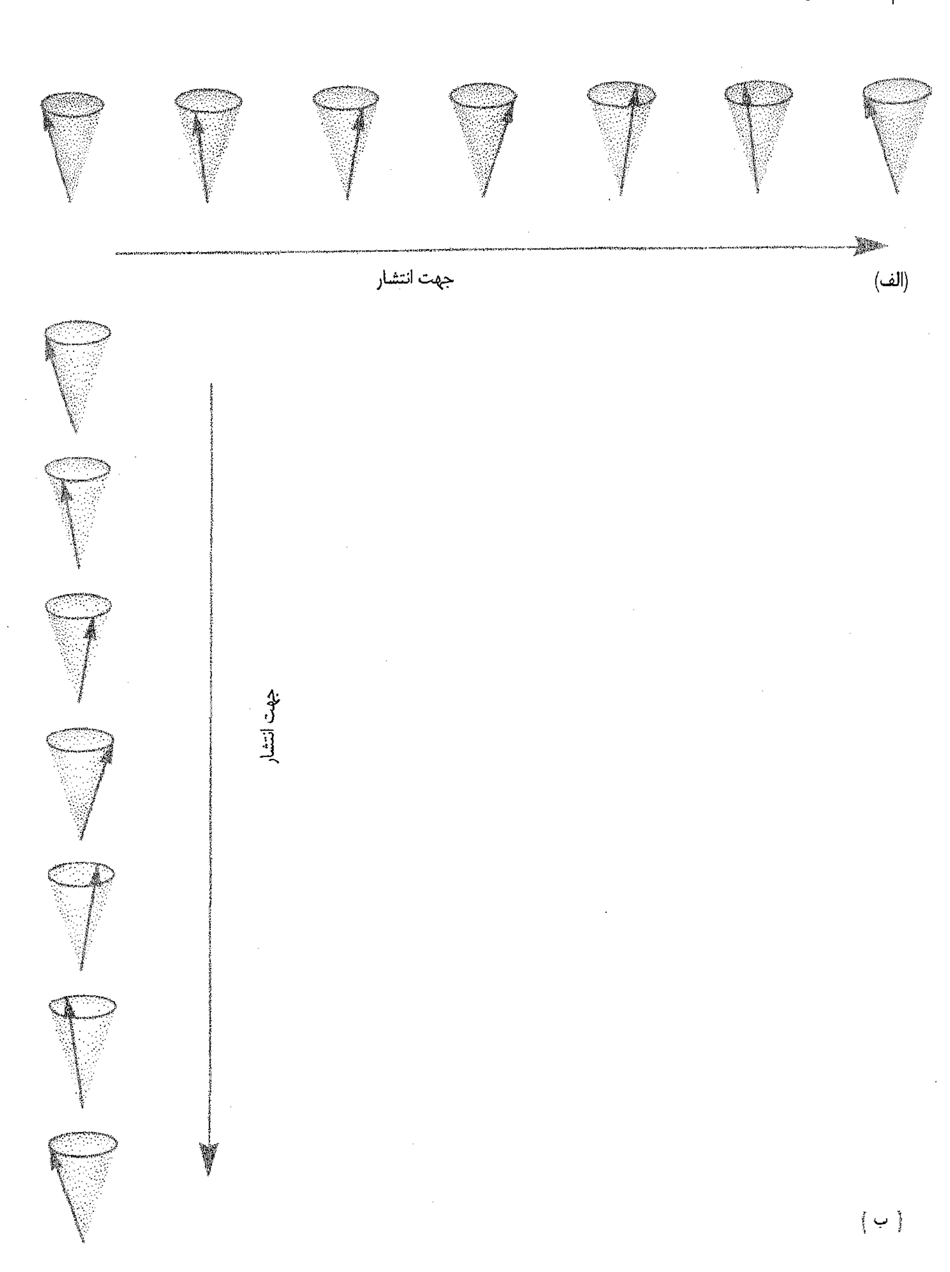
$$\hbar\omega = -۲J\ S\,(e^{-ika} - ۲ + e^{ika}) = ۴JS\,[۱-cos\,(ka)] \qquad (۸\text{-}۳۱)$$

که رابطهٔ پاشندگی برای **امواج اسپینی** است.

رابطهٔ پاشندگی در شکل (۸-۱۰) رسم شده است. همانند امواج ارتعاشی شبکه و حالتهای الکترونی، این رابطه نیز برحسب k با دورهٔ $۲\pi/a$ دوره‌ای است؛ همچنین همانند این موارد اعمال شرایط مرزی دوره‌ای تعیین می‌کند که دقیقاً N مد متمایز ارتعاشی وجود دارد. با استفاده از معادلات (۸-۲۹) و (۸-۳۰) می‌بینیم که σ_{nx} و σ_{ny} به شکل زیرند

$$\sigma_{nx} \propto cos\,(kna - \omega t) \qquad \sigma_{nx} \propto -\ sin\,(kna - \omega t)$$

اختلاف فاز°۹۰ بین σ_{nx} و σ_{ny} اشاره بر آن دارد که (در یک تصویر کلاسیکی) مطابق شکل (۸-۹) هر اسپین حول محور x حرکت تقدیمی دارد. امواج اسپینی در یک بلور سه بعدی نیز بایک رابطهٔ پاشندگی مشابه با معادلهٔ (۸-۳۱) انتشار می‌یابند. همانند مورد یک بعدی نیازی نیست که جهت z مغناطش رابطهٔ خاصی با جهت انتشار **k** داشته باشد. امواج اسپینی با kی موازی و عمود بر z به طور طرح‌وار در شکل ۸-۱۱ نشان داده شده‌اند.



شکل ۸-۱۱: انتشار امواج اسپینی فرومغناطیسی : (الف) عمود بر مغناطش خودبه خودی؛ (ب) موازی با مغناطش خود به خودی.

محاسبهٔ مکانیک کوانتومی امواج اسپینی نیز بـه رابـطهٔ پـاشندگی مـعادلهٔ (۸-۳۱) مـنجر می‌شود، ولی، همان طوری که از مانستگی با ارتعاشات شبکه انتظار داریم، انرژی یک مد با عدد موج k کوانتیده است و فقط مقادیر زیر را مناسب برای نوسانگر هـماهنگ سـاده اخـتیار می‌کند.

$$E=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega\ (k) \qquad (۸-۳۲)$$

کوانتومهای وابسته به مدهای اسپینی را **مگنون** می‌نامند و مگنونها، همانند فوتونها بـوزون هستند. محاسبهٔ مکانیک کوانتومی همچنین نشان می‌دهد که هر مگنون درون بلور، بزرگی مـولفهٔ z اندازه حرکت زاویه‌ای را به اندازهٔ $\hbar$ کاهش می‌دهد و بنابراین مغناطش را به اندازهٔ $g\mu_B$ کاهش می‌دهد.

با استفاده از معادلهٔ (۸-۳۱)، انرژی مگنون در نزدیکی $k=0$ عبارت است از

$$\varepsilon=\hbar\omega\approx 2J\,S\,a^2\,k^2 \qquad (۸-۳۳)$$

بستگی درجه دوم ε برحسب k برخلاف رابـطه خـطی بـرای فـونونهاست[1]. مـقایسه بـا رابـطهٔ پاشندگی $\varepsilon=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ برای ذرات آزاد باجرم m پیشنهاد می‌کند که مگنونهای با طول موج بلند مانند ذرات با جرم مؤثر زیر رفتار می‌کنند.

$$m^*=\frac{\hbar^2}{4J\ S\,a^2} \qquad (۸-۳۴)$$

اگر قرار دهیم $S=\frac{1}{2}$ ، $a=2/5$ Å و $J=0/03eV$ ، آنگاه جرم مؤثر یک مگنون را تقریباً ۲۰ برابر جرمهای موثر الکترونی به دست می‌آوریم.

۸-۵-۳ مغناطش و ظرفیت‌گرمایی در دماهای پایین

سهم امواج اسپینی در ظرفیت گرمایی فرومغناطیسها در دماهای پایین را می‌توان به روشی شبیه روش محاسبهٔ ظرفیت گرمایی ناشی از ارتعاشات شبکه در بخش ۲-۶ مـحاسبه کـرد. تـعداد مدهای موج اسپینی با عدد موج بین k و $k+dk$ از معادلهٔ (۲-۳۸) به صورت زیر داده می‌شود.

$$g(k)\,dk=\frac{Vk^2}{2\pi^2}\,dk$$

در دماهای پایین، فقط مدهای با طول موج بلند کم انرژی برانگیخته خواهند شد و بـرای ایـن مـدها

۱- رابطهٔ پاشندگی برای امواج اسپینی در مواد پاد فرو مغناطیسی در k ی کـوچک **خـطی** است$(\omega\propto k)$ (مسئلهٔ ۸-۸ را ببینید)

می‌توان شکل حالت حدی رابطهٔ پاشندگی، معادلهٔ (۸-۳۳)، را به کار برد و برای تعداد این مدها در گسترهٔ بسامد بین ω و $\omega + d\omega$ چنین نوشت [1].

$$g(\omega)\,d\omega = g(k)\,dk = \frac{V}{۴\pi^۲}\left(\frac{\hbar}{۲J\,Sa^۲}\right)^{۳/۲}\omega^{۱/۲}\,d\omega \qquad (۸\text{-}۳۵)$$

انرژی مربوط به هر مد $\hbar\,\omega\,(n + \frac{۱}{۲})$ است، که در آن n تعداد متوسط مگنونها در دمای T است که توسط تابع بوز-اینشتین بیان می‌شود (معادلهٔ (۲-۲۷))

$$n(\omega) = \frac{۱}{e^{\hbar\omega/k_B\,T} - ۱}$$

بنابراین سهم مگنونها در انرژی به قرار زیر است.

$$E = E_۰ + \int_۰^\infty \hbar\omega\, n(\omega)\, g(\omega)\, d\omega$$

$$= E_۰ + \frac{V}{۴\pi^۲}\left(\frac{\hbar}{۲J\,Sa^۲}\right)^{۳/۲}\left(\frac{k_B\,T}{\hbar}\right)^{۵/۲}\int_۰^\infty \frac{x^{۳/۲}}{e^x - ۱}\,dx \qquad (۸\text{-}۳۶)$$

که در آن $E_۰$ انرژی نقطهٔ صفر و سطر آخر با تغییر متغیر $x = \hbar\omega/k_B\,T$ حاصل شده است. کران بالای انتگرال ∞ قرارداده شده است زیرا $n(\omega)$ انتگرالده را در بسامدهای کوچک، که هنوز معادلهٔ (۸-۳۳) معتبر است، قطع می‌کند. این انتگرال یک عدد (۱/۷۸=) است در نتیجه سهم موج اسپینی در ظرفیت گرمایی در دمای پایین عبارت است از

$$C = \frac{dE}{dT} = \frac{۵\times ۱/۷۸\times V}{۲\times ۴\pi^۲\hbar}\left(\frac{k_B}{۲J\,Sa^۲}\right)^{۱/۲} k_B\ T^{۳/۲} \qquad (۸\text{-}۳۷)$$

بنابراین ظرفیت گرمایی مگنون در دماهای پایین به صورت $T^{۳/۲}$ تغییر می‌کند.

از آنجاکه هر مگنون گشتاور مغناطیسی را به اندازهٔ $g\mu_B$ کاهش می‌دهد، مغناطش دردماهای پایین به قرار زیر است

$$M = M_s - g\mu_B\ N_{mag}$$

۱- فرض می‌کنیم که رابطهٔ پاشندگی همسانگرد است.

که در آن $M_s = Ng\mu_B\ S$ مغناطش اشباعی است و

$$N_{mag} = \frac{1}{V} \int_0^\infty n(\omega) g(\omega) d\omega$$

تعداد مگنونها به ازای واحد حجم است. بنابراین، با ادامهٔ این محاسبه مانند محاسبهٔ گرمای ویژه، به دست آوریم

$$M = M_s \left[1 - \frac{1}{NS\,4\pi^2} \left(\frac{k_B\ T}{2J\,S\,a^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^x - 1}\ dx \right] \qquad (۳۸-۸)$$

این انتگرال نیز یک عدد (۲/۳۲=) است؛ کاهش مغناطش از مقدار اشباعی با وابستگی دمایی $T^{3/2}$ به گونه‌ای که توسط معادلهٔ (۸-۳۸) پیش‌بینی می‌شود با رفتار مشاهده شدهٔ تجربی به مراتب بهتر توافق دارد تا پیش بینی نظریهٔ میدان میانگین در معادلهٔ (۸-۱۴).

*** تشدید فرومغناطیسی و مشاهده تجربی امواج اسپینی**

درحد طول موج بلند، ارتعاشات شبکهٔ بلور اساساً امواج صوتی‌اند، که می‌توانند با بستن وارسانهای مناسب برانگیخته شوند، می‌توان پرسید که آیا برای امواج اسپینی نیز چیزی مشابه وجود دارد. برای دستیابی به امواج صوتی از معادلات حرکت (۲-۷) برای بلور یک بعدی توجه داریم که $(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1})/a^2$ به شکل تفاضل متناهی برای مشتق فضایی دوم d^2u/dx^2 است، درنتیجه در حد طول موج بلند این معادلات را چنین می‌توان نوشت.

$$M \frac{d^2u}{dt^2} = K a^2 \frac{d^2u}{dx^2} \qquad (۳۹-۸)$$

که همان معادلهٔ موج است که سرعت صوت را به درستی به شکل $a(K/M)^{1/2}$ به دست می‌دهد (معادلهٔ ۲-۱۳).

فرض می‌کنیم که یک اغتشاش با طول موج بلند در راستای x در اسپینهای یک مادهٔ فرومغناطیسی وجود داشته باشد. برای توصیف دینامیک چنین اغتشاشی مناسب است که معادلهٔ (۸-۲۶) را به صورت معادله‌ای برای مغناطش موضعی $\mathbf{M}(x,t)$ بازنویسی کنیم، $\mathbf{M}(x,t)$ را با استفاده از معادلهٔ (۸-۳) می‌توان به شکل زیر نوشت

$$\mathbf{M}(x,t) = -Ng\mu_B \langle \mathbf{S}(x,t) \rangle \qquad (۴۰-۸)$$

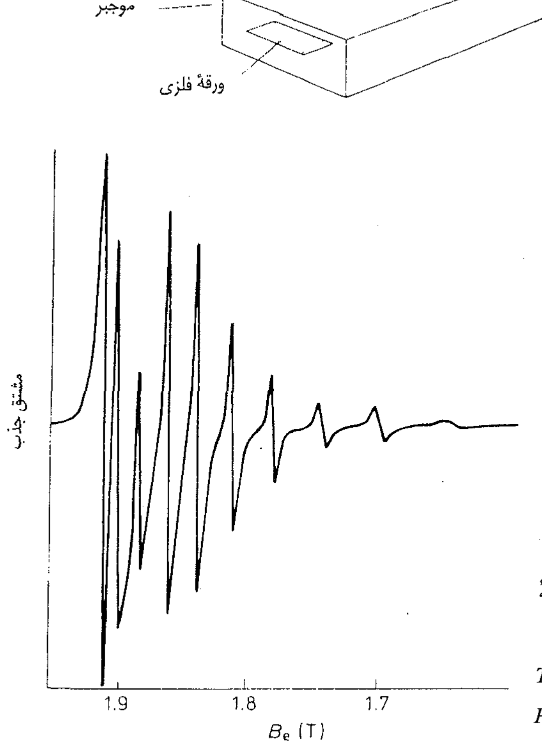
که در آن $\langle \mathbf{S}(x,t) \rangle$ نمایشگر متوسط روی اسپینها در همسایگی نقطهٔ x است. در مورد حرکتهای کوچک در تشابه با معادلهٔ (۸-۲۵) می‌توان نوشت

$$\mathbf{M}(x,t) = \mathbf{M}_\circ + \mathbf{M}_\perp(x,t) \qquad (۴۱\text{-}۸)$$

که درآن $\mathbf{M}_\perp$ انحراف عمودی کوچک $\mathbf{M}$ از مقدار متوسط آن یعنی $\mathbf{M}_\circ$ است. با استفاده از معادلات (۸-۴۰) و (۸-۴۱) معادلهٔ (۸-۲۶) را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$\frac{\partial \mathbf{M}_\perp}{\partial t} = -\frac{2JSa^2}{\hbar}\,\frac{\mathbf{M}_\circ}{[\mathbf{M}_\circ]} \times \frac{\partial^2 \mathbf{M}_\perp}{\partial x^2} \qquad (۴۲\text{-}۸)$$

که در آن درست مانند معادلهٔ (۸-۳۹) به جای مشتق به صورت تفاضل متناهی، خود مشتق به کار رفته است. با دنبال کردن محاسبه به شیوهٔ بخش ۸-۵-۲، به آسانی نشان داده می‌شود که معادلهٔ (۸-۴۲) دارای جوابهای موج گونه با $\mathbf{M}_\perp \propto exp\,[i(kx - \omega t)]$ است که در آن ω و k برای‌امواج اسپینی با kی کوچک توسط رابطهٔ پاشندگی معادلهٔ(۸-۳۳) به هم مربوط می‌شوند.



(الف) هندسهٔ آزمایش برای مشاهدهٔ امواج اسپینی با طول موج بلند.

(ب) تشدید موج اسپینی در یک لایهٔ نازک کبالت. (با اقتباس از *T. G. Philips and H. M. Rosenberg), Phys. Lett.* **8**, *298 (1964)*

شکل ۸-۱۲

یک مجموعه تجربی نوعی برای مشاهدهٔ امواج اسپینی با طول موج بلند در شکل ۸-۱۲ (الف) نشان داده شده است. میدان پایای $\mathbf{B}_e$ عمود بر یک لایهٔ نازک فرومغناطیس اعمال می‌شود؛ میدان را در جهت z اختیار می‌کنیم و فرض می‌کنیم که میدان مغناطش متوسط $\mathbf{M}_\circ$ نمونه را دراین جهت قرار دهد. آنگاه با اعمال میدانی با بسامد رادیویی در صفحهٔ لایه، امواج اسپینی با بردار موج **عمود** بر صفحه لایه برانگیخته می‌شوند. برای تعمیم معادلهٔ (۸-۴۲) برای وقتی که میدان خارجی وجود داشته باشد، باید جملهٔ $\vec{\mu}_n \times \mathbf{B}_{loc}$ را به طرف راست معادلهٔ (۸-۲۴) اضافه کنیم که در آن $\mathbf{B}_{loc}$ میدان مغناطیسی موضعی واقع در مکان n ام است. $\mathbf{B}_{loc}$ شامل سهمی ناشی از مغناطش و همچنین سهمی ناشی از میدان خارجی است و در پیوست (ب) نشان می‌دهیم که در هندسهٔ لایه نازک تحت بررسی داریم

$$\mathbf{B}_{loc} = \mathbf{B}_e - \frac{۲}{۳}\mu_\circ \mathbf{M}_\circ + \frac{۱}{۳}\mu_\circ \mathbf{M}_\perp \qquad (۸\text{-}۴۳)$$

جملهٔ اضافی در معادلهٔ (۸-۲۴) به یک جملهٔ اضافی در طرف راست معادلهٔ (۸-۴۲) منجر می‌شود، که، برای $\mathbf{M}_\perp$ که در جهت z تغییر می‌کند، به صورت زیر درمی‌آورید.

$$\frac{\partial \mathbf{M}_\perp}{\partial t} = -\frac{۲JSa^۲}{\hbar}\frac{\mathbf{M}_\circ}{|\mathbf{M}_\circ|} \times \frac{\partial \mathbf{M}_\perp}{\partial z^۲} + \gamma \mathbf{M}_\perp \times (\mathbf{B}_e - \mu_\circ \mathbf{M}_\circ) \qquad (۸\text{-}۴۴)$$

که در آن $\gamma = -g\mu_B/\hbar = -ge/۲m$ **نسبت ژیرو مغناطیسی** اتم است.

به این ترتیب رابطهٔ پاشندگی موج اسپینی (معادلهٔ (۸-۳۳)) برای امواج به شکل $exp\,[i(kz - \omega t)]$ به صورت زیر تغییر می‌یابد.

$$\omega = \frac{۲JSa^۲}{\hbar} k^۲ - \gamma (B_e - \mu_\circ M_\circ) \qquad (۸\text{-}۴۵)$$

وجود جملهٔ اضافی، یک بسامد متناهی برای حرکت تقدیمی مغناطش که از نظر فضایی یکنواخت است $(k = \circ)$، را نشان می‌دهد، و ستیغ جذب مشاهده شده در بسامد $\omega = -\gamma(B_e - \mu_\circ M_\circ)$ موسوم به **تشدید فرومغناطیسی** است. به‌طورکلی تشدید فرومغناطیسی به شکل نمونه بستگی دارد.

نتایج تجربی نشان داده شده در شکل ۸-۱۲ (ب) برای لایهٔ نازکی از کبالت به دست آمده‌اند که در آن مغناطش توسط همسانگردی موضعی قوی در سطح میخکوب شده است به طوری که در آنجا $\mathbf{M}_\perp = \circ$. این وضعیت مانستهٔ ریسمانی است که بین دو نقطهٔ ثابت کشیده شده باشد؛ فقط مدهای موج اسپینی با تعداد درستی از نصف طول موجها در ضخامت d ی لایه برانگیخته

می‌شوند. از آنجا که لایه در مقایسه با عمق پوستهٔ الکترومغناطیسی نازک است، میدان مغناطیسی با بسامد رادیویی در سرتاسر ضخامت لایه یکنواخت است و فقط هماهنگهای فرد برانگیخته می‌شوند ($k=(2n+1)\pi/d$) . شکل ۸-۱۲ (ب) جذب مربوط به هماهنگهای متناظر با مقادیر $2n+1$ بین ۳ و ۲۱ را نشان می‌دهد. مقدار JSa^2 و بنابراین جرم مؤثر مگنون m^* را می‌توان از این اندازه‌گیریها استنتاج کرد (مسئلهٔ ۸-۹).

* ۸-۶ انواع دیگر نظم مغناطیسی

۸-۶-۱ فری مغناطیس

نظم فری مغناطیسی حالت بینابینی نظم فرو مغناطیسی و نظم پادفرومغناطیسی است؛ دستهٔ مهمی از ترکیباتی که این نظم را نشان می‌دهند فریتها با فرمول عمومی $MO.Fe_2O_3$ اند، که در آن M یک کاتیون دو ظرفیتی مانند Ni ، Mn یا Fe است. اولین تجربهٔ بشر در مورد مغناطیس مطمئناً در مگنتیت (آهنربا) بوده است، مگنتیت و دیگر فریتها دارای ساختار بلوری **اسپینل** با یک یاخته یکهٔ مکعبی مشتمل بر ۳۲ یون اکسیژن در یک آرایهٔ تقریباً تنگ پکیده اند؛ برخی از مکانهای بین جایگاهی بین یونهای اکسیژن توسط یونهای (کوچکتر) Fe^{2+} و Fe^{3+} پر می‌شوند. هشت یون Fe^{3+} در هر یاخته در جایگاههای **چهار وجهی** (A) قرار می‌گیرند. که هر یک توسط چهار اتم اکسیژن احاطه می‌شوند؛ هشت یون باقیماندهٔ Fe^{3+} و هشت یون Fe^{2+} در جایگاههای **هشت وجهی** (B) که توسط هشت اتم اکسیژن احاطه می‌شوند، قرار دارند.

اعتقاد براین است که بر هم‌کنشهای تبادلی بین یونهای مغناطیسی همسایه همگی پاد فرومغناطیسی‌اند؛ ولی برهم کنشهای بین جایگاههای همسایهٔ A و B غالب هستند، در نتیجه اسپینهای مربوط به تمامی جایگاههای A موازی و در جهت مخالف تمامی اسپینهای واقع در جایگاههای B هستند . از آنجا که یونهای Fe^{3+} به طور مساوی جایگاههای A و B را اشغال می‌کنند، مغناطش خالص این یونها صفر است. ولی یونهای Fe^{2+} همگی بر جایگاههای B قرار دارند و یک مغناطش خود به خودی به بار می‌آورند. مقدار حدی دمای پایین مغناطش خود به خودی که متناظر با $32\mu_B$ به ازای هر یاخته است این تصویر را تایید می‌کند. این همان مقداری است که برای هشت یون Fe^{2+} ، که در آنها اندازه حرکت زاویه‌ای مداری فرونشانده شده است، (بنابراین $J=S=2$ و $g=2$) انتظار می‌رود. کاربرد وسیع فریتها در قطعات، ناشی از ترکیب مقاومت ویژه الکتریکی بالای این مواد با تراوایی مغناطیسی مؤثر بالای مربوط به مغناطش خودبه خودی است.

۸-۶-۲ پاد فرومغناطیس موج چگالی اسپین در کروم

کروم به صورت ساختار مکعبی مرکز حجمی متبلور می‌شود. نخستین آزمایشهای پراکندگی

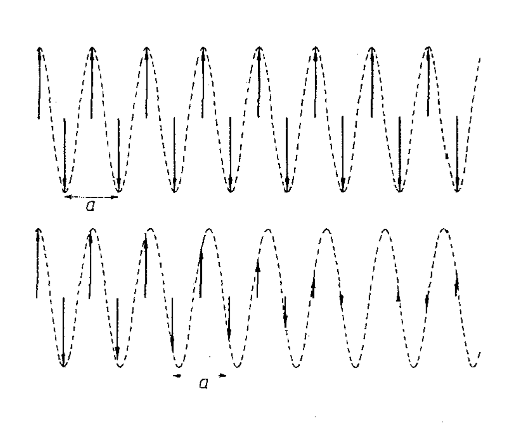
نوترون در زیر دمای نیل K ۳۱۱ ساختار پاد فرومغناطیسی ساده‌ای با اتمهای واقع برگوشه های یاختهٔ یکه را پیشنهاد می‌کند که اسپینهای این اتمها در جهت مخالف اسپینهای اتمهای واقع در مکانهای مرکز حجمی است. از آنجاکه کروم یک فلز واسط است، انتظار داریم که نمایش نواری الکترونهای $3d$ ، نظم مغناطیسی را به بهترین نحو توصیف کند. در چنین نمایشی نظم پاد مغناطیسی را می‌توان توسط یک تغییر دوره‌ای مکانی چگالی $n\uparrow$ الکترونهای با اسپین↑، با چگالی $n_\downarrow$ الکترونهای با اسپین ↓ که در فاز مخالف هم تغییر می‌کنند توصیف کرد، در نتیجه چگالی الکترونی کل $(n_\uparrow + n_\downarrow)$ ثابت است، ولی چگالی اسپینی $(n_\uparrow - n_\downarrow)$ نوسانی است.

نتیجه به صورت یک **موج چگالی اسپین** *(SDW)* است. یک راه ممکن ایجاد ساختار پادفرومغناطیسی ساده‌ای که در بالا توصیف شد بر پاداشتن یک SDW با بردار موج $2\pi/a$ (طول موج a) در جهت [۱۰۰] است؛ شکل ۸-۱۳ (الف) نمایشگر این وضعیت همراه با پیکانهایی است که چگالی اسپین در مکانهای شبکه را نشان می‌دهند[1]. این SDW را **متوافق** گویند زیرا دارای دورهٔ همانند دورهٔ شبکه است؛ آنرا استاتیک (ایستا) نیز می‌نامند زیرا چگالی اسپین با زمان تغییر نمی‌کند.

آزمایشهای پراکندگی نوترونی بعدی بر روی Cr نشان دادند که در حقیقت SDW ی با بردار موج Q ی در حدود ۴.٪ کمتر از $2\pi/a$ در جهت [۱۰۰]، با شبکه **نامتوافق** است. ساختار مغناطیسی حاصل در شکل ۸-۱۳ (ب) نشان داده شده است و متناظر با یک مدولاسیون آهستهٔ چگالی اسپین در جایگاههای اتمی در فضا است. توجه داشته باشید که SDW های توصیف شده توسط بردارهای Q ی با بزرگی یکسان در جهتهای [۰۱۰] و [۰۰۱] به دلیل تقارن باید متناظر با انرژی یکسانی باشند. جهت پیکانها در شکل ۸-۱۳ (ب) الزاماً به مفهوم نشان دادن جهت قطبش اسپین نسبت به بردار موج Q نیست: آزمایشهای پراکندگی نوترون نشان می‌دهند که قطبش اسپین برای $T > 123K$ عمود بر Q و در زیر این دما موازی با Q است. گشتاورهای مغناطیسی جایگزیده احتمال ندارد که بتوانند چنین ساختار مغناطیسی را تولید کنند؛ وجود یک SDW ی نامتوافق گواه قانع کننده‌ای بر وجود یک نمایش نواری برای الکترونهای $3d$ است.

برای تجسم اینکه چرا چنین ساختاری می‌تواند از نظر انرژی ارجح باشد، نخست یک جامد تک بعدی را بررسی می‌کنیم. در فصل ۴ نشان دادیم که پتانسیل شبکهٔ دوره‌ای تاثیر شدیدی بر رابطهٔ پاشندگی الکترونی برای بردارهای موج نزدیک به مرزهای منطقهٔ بریلوئن،

۱- SDW های با بردار موج $2\pi/a$ در هریک از جهتهای[۰۱۰] یا [۱۰۰] ساختار پاد فرومغناطیسی یکسانی را در جایگاههای شبکه ارائه می‌دهند، SDW ی پیچیده‌تری که از جمع‌بندی سه SDW در جهتهای [۱۰۰]، [۰۱۰] و [۰۰۱] حاصل می‌شود نیز در واقع همین‌گونه است، این SDW ی پیچیده‌تر تقارن bcc ی شبکه را بهتر نشان می‌دهد.



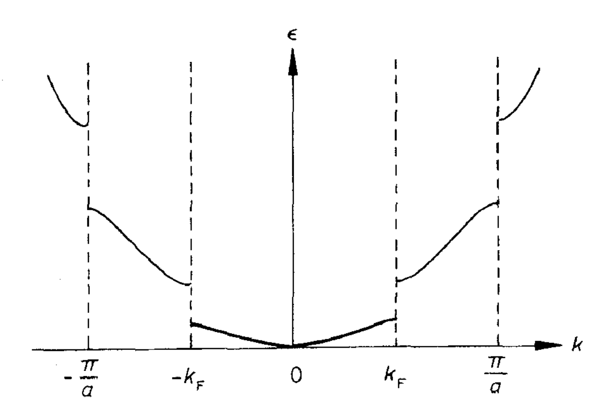
(الف) موج چگالی اسپین متوافق با شبکهٔ bcc. بردار موج در جهت x برابر $2\pi/a$ است. پیکانهای ↑ و ↓ به ترتیب چگالی اسپین در اتمهای گوشه و اتمهای مرکز حجم را نشان می‌دهند.

(ب) موج چگالی اسپین نامتوافق با طول موجی در حدود $1/04a$. پیکانها همانند شکل (الف) نشانگر چگالی اسپین در جایگاههای شبکه‌اند.

شکل ۸-۱۳

$k=n\pi/a$، دارد که در آن a فاصلهٔ شبکه و n یک عدد درست است؛ همان‌طور که در شکل ۴-۲ نشان داده شده است به ازای k بلافاصله درون مرز انرژی به زیر مقدارش برای الکترون آزاد کاهش می‌یابد و به ازای k بلافاصله در خارج از مرز افزایش می‌یابد. شکل ۴-۱ (ب) نشانگر آن است که کاهش در انرژی برای k بلافاصله داخل مرز رخ می‌دهد زیرا تابع موج یک موج ایستادهٔ چگالی الکترون با بیشینه‌های واقع بر جایگاههای شبکه‌ای که در آنها پتانسیل پایین است مربوط می‌شود؛ این وضعیت را می‌توان به منزلهٔ یک موج ***چگالی بار*** متوافق ایستا توصیف کرد. شکل ۴-۳ (الف) بیانگر آن است که چرا این بارها در رابطهٔ پاشندگی اثر کمی بر خواص جامدهای فلزی دارند، زیرا اصولاً بردار موج فرمی k_F به مرز منطقهٔ بریلوئن نزدیک نیست.

ولی اگر قرار باشد یک پتانسیل دوره‌ای با دورهٔ π/k_F به طریقی بر جامد اعمال شود، در این صورت در سطح فرمی، یعنی همان طور که در شکل ۸-۱۴ نشان داده شده است و در اعداد موج $k=\pm k_F$ گافهای انرژی ایجاد می‌شوند. می‌بینیم که انرژی حالتهای ***اشغال شده*** به ازای $|k|<k_F$ تحت اثر این پتانسیل پایین آورده می‌شود و انرژی حالتهای ***اشغال نشده*** با $|k|>k_F$ افزایش می‌یابد، و یک کاهش کلی در انرژی الکترونها را به بار می‌آورد. بنابراین برای گاز الکترونی بهتر آن است که به طور خود به خودی تغییر شکل دهد تا چنین پتانسیلی را تولید کند و یک SWD ی نامتوافق با عدد موج $2k_F$ یک تغییر شکل ممکن از این نوع است؛ کاهش انرژی متناظر با تغییرات در رابطهٔ پاشندگی بیش از مقداری است که برای جبران هر گونه افزایش درانرژی متناظر با تغییر شکل (برای مثال، برهم کنشهای

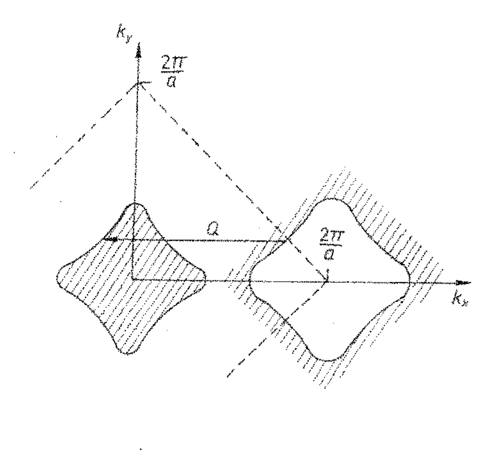


شکل ۸-۱۴: پتانسیلی با دورهٔ π/k_F گافهایی در رابطهٔ پاشندگی الکترون در سطح فرمی، $k=k_F$، وارد می‌کند، این گافها مانستهٔ گافهایی هستند که توسط یک پتانسیل، با دورهٔ a تولید می‌شوند. حالتهای اشغال شده با خط درشت‌تر نشان داده شده‌اند.

الکترون–الکترون) مورد نیاز است. پیامد مهمی از ظهور گافهای انرژی در سطح فرمی آن است که فلز را به عایق تبدیل می‌کند[1] .

این استدلال ساده را فقط در مورد جامدهای یک بعدی می‌توان به کار برد. در دو و سه بعد یک SDW نمی‌تواند در تمام نقاط واقع بر سطح فرمی یک گاف انرژی تولید کند. لذا سازوکار پیشنهاد شده، به شرط آنکه دو قسمت مختلف سطح فرمی را بتوان توسط یک انتقال صلب در فضای $\mathbf{k}$ تقریباً به انطباق در آورد فقط در کاهش انرژی مؤثر است. در شکل ۸-۱۵ (الف) قسمتی از صفحهٔ k_x و k_y که دو سطح فرمی پیچیدهٔ Cr را قطع می‌کند نشان داده شده است؛ انتقال توسط بردار $\mathbf{Q}$ انتقال تقریبی که در شکل ۸-۱۵ (ب) نشان داده شده‌است را می‌دهد، این پدیده به منزلهٔ **لانه سازی** توصیف می‌شود. یک SDW ی با بردار موج $\mathbf{Q}$ گافهای انرژی را در امتداد ناحیه‌ای از سطح فرمی که برای آنها لانه سازی ممکن است تولید می‌کند. مقاومت ویژهٔ الکتریکی Cr بلافاصله زیر دمای نیل افزایش می‌یابد و این افزایش را می‌توان به خاطر تشکیل

۱– در یک جامد یک بعدی نیز یک موج چگالی بار متوافق می‌تواند به ظهور گافهای انرژی در سطح فرمی منجر شود. پیرلز نشان داد که یک فلز یک بعدی همواره در مقابل تشکیل یک CDW ی نامتوافق همراه با یک واپیچش شبکه ناپایدار است؛ بنابراین یک جامد یک بعدی نمی‌تواند وجود داشته باشد. CDWها در دی چالکوگنیدهای فلزات واسط که در آنها زنجیرهای اتمی رفتار یک بعدی دارند، مشاهده شده‌اند.



(الف) مقطعی از دو قطعهٔ سطح فرمی Cr در صفحهٔ k_x و k_y در فضای $\mathbf{k}$. این دو قطعه در دو نوار انرژی متفاوت ولی همپوشان اتفاق می‌افتد. در این شکل سایه نشانگر حالتهای اشغال شده است. خط‌چینها منطقهٔ اول بریلوئن را نشان می‌دهند، و طرح منطقهٔ تکراری برای گسترش سطح فرمی در خارج از این منطقه به کاربرده شده‌اند(شکلهای ۴-۹ ، ۴-۱۰ را ببینید)

(ب) یک انتقال نسبی توسط بردار موج $\mathbf{Q}$ خاصیت لانه سازی دو مقطع سطح فرمی را نشان می‌دهد. پتانسیل دوره‌ای وابسته به یک واپیچش با عدد موج $\mathbf{Q}$ می‌تواند گافهای انرژی را در نواحی همپوشان تولید کند.

شکل ۸-۱۵

این گافهای انرژی دانست که تعداد الکترونهایی که در فرایند رسانش شرکت می‌کنند را کاهش می‌دهد.

۸-۶-۳ نظم مغناطیسی در فلزات خاکی‌کمیاب

فلزات خاکی کمیاب یا به شکل ساختار تنگ پکیدهٔ شش‌گوش (شکل ۱-۱۱) و یا به شکل ساختارهای بسیار مشابه با تقارن شش گوشی با ترتیب روی هم چینی پیچیده‌تر از لایه‌های تنگ پکیده متبلور می‌شوند. آزمایشهای پراکندگی نوترون بر روی تک بلورها تنوع زیادی از نظم مغناطیسی را در این فلزات آشکار نموده‌اند. برای مثال دیسپروزیوم در زیر $85K$ فرومغناطیس ساده‌ای با مغناطش خودبه خودی در جهتی موازی با صفحات تنگ پکیده و عمود بر محور z است. بین ۸۵ تا K ۱۷۹ این نظم به صورت فرومغناطیسی در داخل یک لایهٔ تنگ پکیده باقی می‌ماند، ولی با رفتن از یک لایه به لایهٔ مجاورش جهت مغناطش به اندازهٔ یک زاویهٔ تابع دما از مرتبهٔ $30°$ حول محور z می‌چرخد و یک نظم مارپیچی اسپینها را تولید می‌کند. چنین نظمی را می‌توان همانند یک موج چگالی اسپین ناموافق با قطبش عرضی دایره‌ای و با بردار موج موازی

با محور z توصیف کرد. دیسپروزیوم در بالای ۱۷۹ K پارامغناطیس است. اکثر فلزات خاکی کمیاب در برخی شرایط چنین نظم مارپیچی نشان می‌دهند. حتی ترتیب‌های پیچیده‌تری نیز ممکن است روی دهد که در آنها نظم مارپیچی با مؤلفه‌ای از مغناطش در امتداد محور z همراه است که ممکن است رفتار دوره‌ای نیز داشته باشد.

۸-۷ حوزه‌های فرومغناطیسی

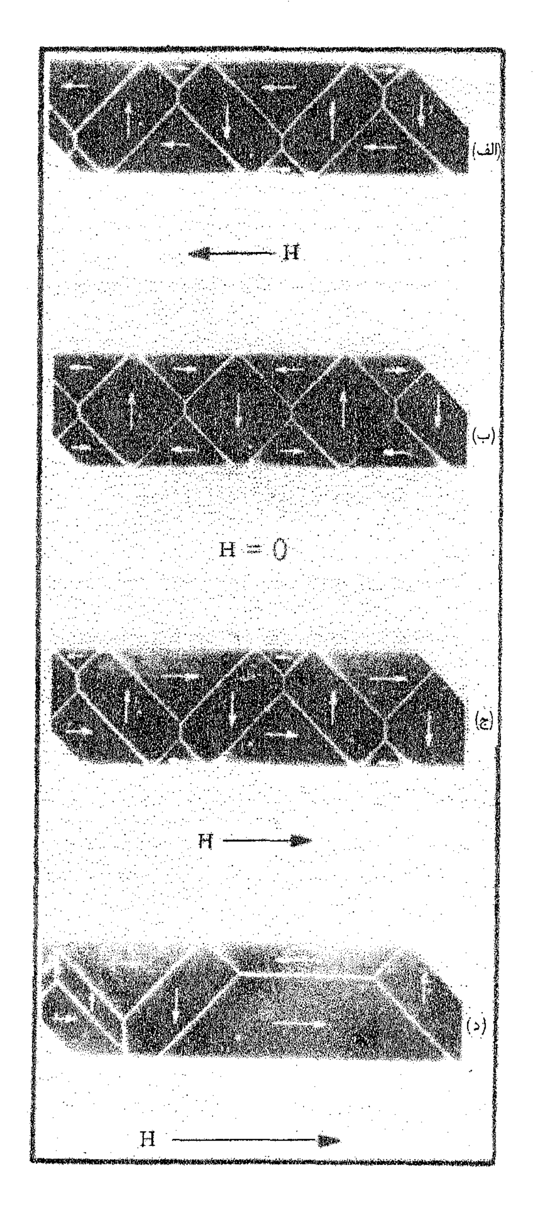
علی‌رغم وجود یک مغناطش خودبه خودی، در غیاب میدان اعمالی نمونه‌های ماکروسکوپی مواد فرومغناطیسی دارای یک گشتاور دو قطبی کلی ناچیزند. این به دلیل تمایل این مواد به داشتن تعدادی از نواحی کوچک، مشهور به **حوزه‌ها**، است که در آنها مغناطش در جهتهای مختلف قرار می‌گیرد. شکل ۸-۱۶ نشانگر این حوزه‌ها در یک تک بلور آهن به ضخامت ۵۰μm است. در این مادهٔ مکعبی مرکز حجمی، ناهمسانگردی بلورین به جهتهای مغناطش موازی با هریک از لبه‌های یاختهٔ یکه یعنی یکی از شش جهت معادل [۱۰۰]، [۰۱۰]، [$\bar{1}$۰۰]، [۰$\bar{1}$۰]، [۰۰$\bar{1}$] و [۰۰۱] برتری می‌دهد. اینها جهتهای اتخاذ شده توسط مغناطش در داخل حوزه‌ها در شکل ۸-۱۶ که توسط پیکانها نشان داده شده‌اند را توصیف می‌کنند.

با وجودی که مرزهای بین حوزه‌ها در شکل ۸-۱۶ تیز هستند، در واقع ناحیهٔ گذار نازکی وجود دارد که به **دیوار بلوخ** معروف است. مغناطش در داخل این دیوار به طور هموار از مقدار خود در یک حوزه به مقدارش در حوزهٔ دیگر تغییر می‌کند. شکل ۸-۱۷ یک دیوار بلوخ را نشان می‌دهد که در آن مغناطش به طور هموار به اندازهٔ زاویهٔ 180° حول محوری عمود بر دیوار می‌چرخد.

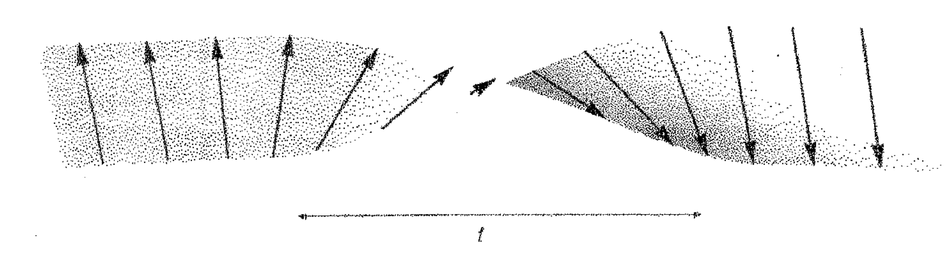
۸-۷-۱ انرژی و ضخامت یک دیوار بلوخ

برای محاسبهٔ انرژی یک دیوار بلوخ لازم است که تغییر در انرژی تبادلی ناشی از تغییر مغناطش با مکان را به حساب آوریم و این واقعیت را در نظر بگیریم که در داخل دیوار مغناطش در جهتی که به لحاظ ناهمسانگردی بلورین برتر است قرار نمی‌گیرد. با درنظرگرفتن یک مثال ساده که در آن اسپینها برروی یک شبکهٔ مکعبی ساده به ضلع a قرار می‌گیرند و یک دیوار حوزه که همانند شکل ۸-۱۷ در صفحهٔ yz است، اصول محاسبه را توضیح می‌دهیم: فرض می‌کنیم اسپینها از راستای z تا راستای z- در مسافتی برابر N فاصلهٔ اتمی واقع در امتداد محور x حول محور x بچرخند. برای وضعیتی که در آن $\pm z$ **جهتهای آسان** مغناطش‌اند که توسط ناهمسانگردی بلوری[1] برتری پیدا می‌کنند، چنین دیوار حوزه‌مناسب

۱- از ناسازگاری موجود در این مدل، که در آن فرض شده است ناهمسانگردی تک محوری در یک بلور با تقارن مکعبی وجود دارد، چشم پوشی می‌کنیم.



شکل ۸-۱۶: عکسهایی که اثر میدان مغناطیسی اعمالی بر حوزه‌های درون یک تارهٔ ۵۰ میکرومتری آهن را نشان می‌دهند: (الف) و (ج) حرکت برگشت‌پذیر دیوار حوزه مربوط به میدانهای اعمالی کوچک را نشان می‌دهند؛ (د) نشانگر آن است که یک میدان قوی‌تر باعث ناپدید شدن حوزه‌ها می‌شود، این فرایند کاملاً برگشت پذیر نیست. (اقتباس با کسب اجازه از *R. W. DeBlois* و *C. D. Graham*، (*J. Appl. Phys.* **29**, *931 (1958)*) است.



شکل ۸-۱۷ : نمودار طرحواری یک دیوار بلوخ بین دو حوزه

چگالی انرژی ناهمسانگردی تابعی از θ، زاویه بین جهت موضعی مغناطش و محور z خواهد بود. برای مثال، در کبالت با ساختار تنگ پکیدهٔ شش گوشی، جهتهای آسان برای مغناطش عبارتند از $\pm z$ و چگالی انرژی ناهمسانگردی به شکل زیر است

$$E_{anis} = K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta \quad (۸-۴۶)$$

که در آن $K_1 = ۴/۱ \times ۱۰^۵ \, Jm^{-۳}$ و $K_2 = ۱ \times ۱۰^۵ \, Jm^{-۳}$؛ بنابراین در این ماده انرژی حالتی با اسپینهای موازی با محور آسان ($\theta = ۰$) به اندازهٔ $K = K_1 + K_2 = ۵/۱ \times ۱۰^۵ J m^{-۳}$ از انرژی حالت با اسپینهای عمود بر این محور ($\theta = ۹۰°$) کمتر است. مغناطش، به دلیل ناهمسانگردی با بیشترین سرعت دور می‌زند و از جهتی که در آن انرژی بیشترین مقدار را دارد ($\theta = ۹۰°$ برای مثال بالا) می‌گذرد. ولی از این اثر صرفنظر می‌کنیم و فرض می‌کنیم زاویهٔ چرخش یکنواخت π/N رادیان بین اسپینهای همسایه در جهت x وجود دارد. همچنین از جزئیات انرژی ناهمسانگردی که برای مثال توسط معادلهٔ (۸-۴۶) نشان داده می‌شود چشم پوشی می‌کنیم و با فرض اینکه عملاً نصف اسپینها در این دیوار در جهت نامطلوب قرار می‌گیرند، تخمین خامی از انرژی ناهمسانگردی افزایش یافته را به دست می‌آوریم. آنگاه انرژی ناهمسانگردی به ازای واحد سطح دیوار برابر است با

$$\sigma_{anis} \approx \frac{۱}{۲} K N a \quad (۸-۴۷)$$

که در آن Na **حجم** دیوار به ازای واحد سطح است و، با استفاده از رابطهٔ فوق، انتظار داریم که $K \approx ۵ \times ۱۰^۵ \, Jm^{-۳}$.

برای تخمین افزایش انرژی تبادلی مربوط به تشکیل دیوار، فقط برهم کنشهای تبادلی نزدیکترین همسایه را به حساب می‌آوریم. چون اسپینها برروی یک شبکهٔ مکعبی ساده قرار

دارند یک اسپین در دیواره حوزه دارای چهار نزدیکترین همسایه و دو همسایه با زاویهٔ π/N نسبت به آن است؛ لذا با استفاده از معادلهٔ (۸-۱) سهم آن در انرژی تبادلی عبارت است از

$$[-۴JS^{۲}+۲JS^{۲}\cos^{۲}(\pi/N)]\approx -۶JS^{۲}+JS^{۲}\pi^{۲}/N^{۲}$$

که در آن از بسط زاویهٔ کوچک تابع کسینوسی استفاده کرده‌ایم. جمله اول در طرف راست انرژی تبادلی به ازای واحد حجم بلوری که به طور یکنواخت مغناطیده شده است را به قرار زیر ارائه می‌کند.

$$-W=-\frac{۶JS^{۲}}{a^{۳}}\approx -۵\times ۱۰^{۸}\,J\,m^{-۳} \qquad (۴۸-۸)$$

که در آن $۱/a^{۳}$ تعداد اتمها به ازای واحد حجم است و $J=۰/۰۳eV$، $S=\frac{۱}{۲}$ و $a=۲/۵\,\text{Å}$ را برای تخمین عددی به کار برده‌ایم . جملهٔ دوم تغییر انرژی متناظر با تغییر مغناطش با مکان را بیان می‌کند و به سهمی در انرژی دیوار به ازای واحد سطح منجر می‌شود.

$$\sigma_{exch}=\frac{JS^{۲}\pi^{۲}}{N^{۲}}\times\frac{N}{a^{۲}}=\frac{\pi^{۲}Wa}{۶N} \qquad (۴۹-۸)$$

که در آن $N/a^{۲}$ تعداد اسپینها به ازای واحد سطح دیوار است و برای به دست آوردن رابطهٔ نهایی از معادلهٔ (۸-۴۸) استفاده کرده‌ایم.

انرژی کل دیوار به ازای واحد سطح با جمع کردن معادلات (۸-۴۷)و (۸-۴۹) عبارت است از

$$\sigma=\frac{۱}{۲}KNa+\frac{\pi^{۲}Wa}{۶N}$$

همچنان که N (و بنابراین پهنای دیوار) افزایش یابد، انرژی ناهمسانگردی افزایش می‌یابد ولی انرژی تبادلی کاهش می‌یابد. پهنای بهینه پهنایی است که برای آن σ کمینه شده است و در نتیجه داریم

$$\frac{d\sigma}{dN}=\frac{۱}{۲}Ka-\frac{\pi^{۲}Wa}{۶N^{۲}} \quad \text{یا} \quad N=\left(\frac{\pi^{۲}W}{۳K}\right)^{۱/۲}$$

که با کلفتی دیوار

$$t=Na=\pi a\left(\frac{W}{۳K}\right)^{۱/۲} \qquad (۵۰-۸)$$

متناظر است و انرژی دیوار به ازای واحد سطح عبارت است از

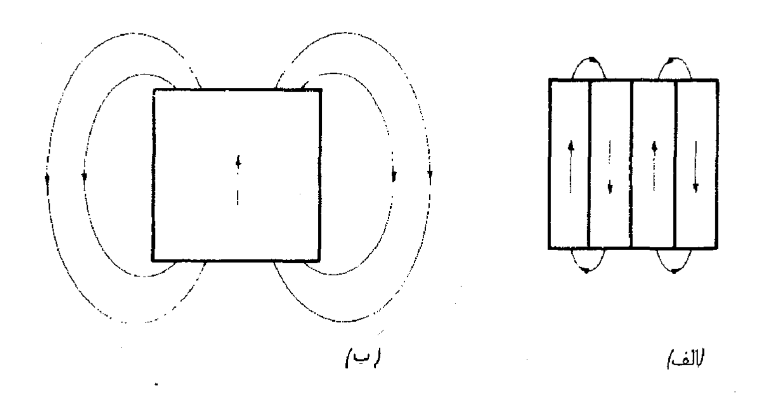
$$\sigma=\pi a\left(\frac{WK}{۳}\right)^{۱/۲} \qquad (۵۱-۸)$$

بنابر تخمین‌های بالا، انرژی تبادلی W بسیار بزرگتر از انرژی ناهمسانگردی K است و این بدان معناست که یک دیوار بلوخ شامل تعداد زیادی (حدود ۱۰۰۰) اتم در عرض است. با توجه به آنکه محاسبهٔ ما نشان می‌دهد که انرژی یک دیوار بلوخ بیشتر از انرژی یک ناحیهٔ با مغناطش یکنواخت است، باید توضیح دهیم که چرا چنین دیوارهایی ظاهر می‌شوند، و در بخش بعد چنین خواهیم کرد.

۸-۷-۲ چرا حوزه‌ها رخ می‌دهند؟

اگر یک بلور فرومغناطیسی شامل یک تک حوزه باشد، همان طور که در شکل ۸-۱۸ (الف) نشان داده شده است، سهم قابل ملاحظه‌ای در انرژی کل ($B^2 / 2\mu_0$ به ازای واحد حجم) ناشی از میدان مغناطیسی خارج بلور است، و برای کاهش این انرژی است که همهٔ نمونه‌ها به استثنای کوچکترین آنها، مطابق شکل ۸-۱۸ (ب)، به حوزهایی تقسیم می‌شوند. اندازهٔ بهینهٔ حوزه‌ها از کمینه سازی مجموع انرژی میدان خارجی و انرژی دیوارهای بلوخ تعیین می‌شود. اگر حوزه‌ها بزرگتر از اندازهٔ بهینه باشند، انرژی ذخیره شده در میدان سهم برتر را دارد، و اگر حوزه‌ها کوچکتر از اندازهٔ بهینه باشند، انرژی دیوارهای حوزه بسیار بزرگ است.

در بلورهای مکعبی مانندآهن که در آنها چند جهت آسان معادل برای مغناطش وجود دارد وضعیت متفاوت است. با تشکیل **حوزه‌های بستاری**، مانند حوزه‌هایی که در شکل ۸-۱۹(الف) نشان داده شده است، می‌توان میدان خارجی را تقریباً به صفر کاهش داد (شکل ۸-۱۶ (ب) را نیز ببینید). ممکن است سؤال شود که چرا حوزه‌های بستاری به جای شکل ۸-۹ (ب) شکل ۸-۱۹ (الف) را



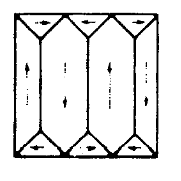
شکل ۸-۱۸: کاهش انرژی ذخیره شده در میدان خارجی در اثر تشکیل حوزه‌ها

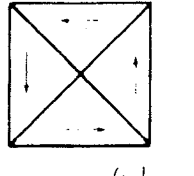
اختیار می‌کنند که دارای دیوار بلوخ با مساحت خیلی کوچکتری است. دلیل آن مغناطوتنگش است، یک بلور مغناطیده تمایل به انبساط یا انقباض در امتداد جهت مغناطش دارد. واپیچش حوزه‌های مختلف درشکل ۸-۱۹ (ب) ناسازگارند و یک انرژی تنش مثبت را نتیجه می شوند. انرژی تنش کشسان با داشتن حوزه‌های بستاری کوچکتر که در شکل ۸-۱۹ (الف) نشان داده شده است کاهش می‌یابد؛ بنابراین اندازهٔ بهینهٔ حوزه‌ها در این مورد از موازنهٔ بین انرژی دیوار بلوخ و انرژی مغناطوکشسانی تعیین می‌شود.

۸-۷-۳ منحنیهای مغناطش فرو مغناطیسها

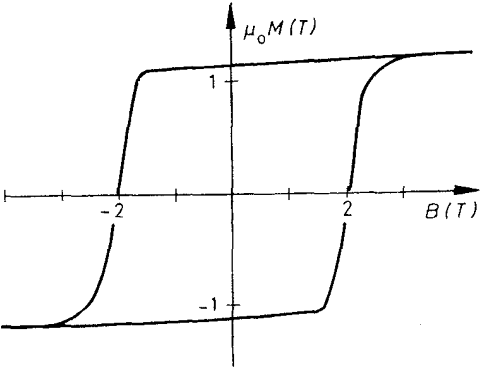
با وجودی که در میدان اعمالی صفر، گشتاور دو قطبی کل یک نمونهٔ فرومغناطیسی ماکروسکوپی، به دلیل تشکیل حوزه، می‌تواند صفر باشد، ولی اغلب یک گشتاور دو قطبی بزرگ توسط یک میدان اعمالی متوسط ایجاد می‌شود. در این مورد ماده دارای تراوایی مغناطیسی موثر بزرگی است. فرایند مغناطش در ساده‌ترین شکلش، برای یک تارهٔ تک بلور آهن، توسط نقشهای حوزه که در شکل ۸-۱۶ نشان داده شده است توضیح داده می‌شود. برای میدانهای کوچک نشان داده در شکل ۸-۱۶ (الف) تا (ج) مغناطش توسط حرکت تقریباً برگشت‌پذیر دیوارهای حوزه رخ می‌دهد، ولی برای میدانهای بزرگتر (شکل ۸-۱۶(د)) تغییرات برگشت ناپذیر مغناطش با ناپدید شدن حوزه‌های نامطلوب رخ می‌دهد. سرانجام به وضعیتی می‌رسیم که در آن بلور شامل یک تک جوزه با مغناطش در امتداد نزدیک‌ترین جهت آسان نسبت به میدان اعمالی است. میدانهای بسیار قوی بر ناهمسانگردی بلورین غلبه می‌کنند و باعث می‌شوند که مغناطش، اگر قبلاً موازی با میدان اعمالی نشده باشد، به سوی راستای میدان اعمالی بچرخد.

فرایندهای مغناطش، در جامدهای حجیم بس بلوری با آنکه چندان هم قابل تمیز نیستند، در اساس یکسانند. در نتیجه به دلیل ناهمگنی ممکن است حرکت مرز حوزه بسیار بیشتر برگشت‌ناپذیر باشد. در حقیقت یک شگرد مهم در ساختن مواد با نیروی


(الف)


(ب)

شکل ۸-۱۹ : تشکیل حوزه‌های بستاری به یک میدان خارجی کوچک که از بین می‌رود منجر می‌شود: (الف) و (ب) در این خاصیت شریک‌اند ولی (ب) انرژی مغناطوکشسانی بیشتری دارد.



شکل ۸-۲۰ : منحنی پسماند برای $Nd_2Fe_{14}B$ که حاوی مقادیر کمی از Dy است. آلیاژهای $NdFeB$ برای ساختن آهنرباهای دائمی با میدان بزرگ به کار می‌روند (اقتباس با اجازه از *(H. R. Kirchmaryer*

وادارندهٔ بزرگ برای آهنرباهای دائمی عبارت است از واردکردن ناهمگنی‌ها برای جلوگیری از حرکت مرز حوزه، برای مثال با وارد کردن یک سیستم آلیاژ دو فازی می‌توان از حرکت مرز حوزه جلوگیری کرد. یک مثال با نوعی از منحنی پسماند که به این طریق حاصل می‌شود در شکل ۸-۲۰ نشان داده شده‌است . برعکس امکان تهیهٔ مواد فرومغناطیس با تراوایی موثر بسیاربالا و منحنیهای مغناطش تقریباً برگشت ناپذیر وجود دارد؛ از این مواد در مغزهای مبدلها و برای استتار مغناطیسی استفاده می‌شود.

مسایل ۸

۸-۱ با استفاده از نتیجهٔ

$$\mathbf{S}^2 = (\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2)^2 = \mathbf{s}_1^2 + \mathbf{s}_2^2 + 2\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$$

ویژه مقدارهای $\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$ را برای حالتهای یگانهٔ اسپین و سه گانهٔ اسپین دو الکترون حساب کنید. سپس نشان دهید که یک برهم کنش تبادلی به شکل $2J\,\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$ - اشاره بر آن دارد که انرژی حالت یگانه به اندازهٔ $2J$ بیش از انرژی حالت سه گانه است.

۸-۲ فرضهای نظریهٔ میدان مولکولی وایس را در مورد فرومغناطیس بیان کنید. معادلهٔ (۸-۴) را با استفاده از معادلهٔ(۸-۱)به دست آورید.

با استفاده از هامیلتونی (۸-۶) برای تعیین انرژی داخلی نشان دهید که سهم مغناطیسی در گرمای ویژهٔ یک فرومغناطیس در میدان اعمالی صفر در تقریب میدان میانگین عبارتست از $C_m = -\frac{1}{2}\lambda\mu_0\, d(M^2)/dT$. شکلهای حدی C_m را برای $T \to 0$ و $T \to T_c$ نشان دهید. طبیعت ترمودینامیکی گذار در نقطهٔ کوری در میدان اعمالی صفر چیست؟

۸-۳ نشان دهید که معادلهٔ ۸-۷ را می‌توان چنین نوشت

$$m = \frac{M}{N\mu_B} = \frac{h + tanh\,(m/t)}{۱ + h\,tanh\,(m/t)}$$

که در آن $h = tanh\,(\mu_B\, B\,/\,k_B T)$. سپس با استفاده از بسط زاویهٔ کوچک $tanh\ x \approx x - x^{۳}/۳$ نشان دهید که مدل وایس پیش‌بینی می‌کند که در میدانهای اعمالی کوچک در $T = T_c$ مغناطش M به‌شکل $B^{۱/۳}$ تغییر می‌کند. آیا انتظار دارید که در عمل این رابطه برقرار باشد؟

۸-۴ در یک شبکهٔ fcc از اسپینهای مغناطیسی غیر ممکن است که یک ترتیب پادفرومغناطیسی بیابیم که در آن تمامی نزدیکترین همسایگان هر اسپین با آن پادموازی باشند. بهترین ترتیبی که می‌تواند حاصل شود، برای مثال با داشتن اسپینهای ↑ و ↓ به طور یک در میان در صفحات (۲۰۰)، هشت همسایهٔ پادموازی و چهار همسایهٔ موازی وجود دارند (شاخصهای میلر به یاختهٔ یکه مکعبی قراردادی مربوط می‌شوند.)

برای موردی که یک اسپین دارای z_a نزدیکترین همسایگان پادموازی و z_p نزدیکترین همسایگان موازی باشد و فقط بر هم کنشهای تبادلی نزدیکترین همسایگان مهم باشند، نظریهٔ نیل مناسبی به دست آورید؛ میدان مؤثر وارد بر یک یون واقع بر زیر شبکهٔ A عبارت است از $\mathbf{B}^A_{eff} = \mathbf{B}_{loc} - \lambda_a\,\mathbf{M}_B - \lambda_p\,\mathbf{M}_A$ و برای $\mathbf{B}^B_{eff}$ نیز رابطه مشابهی می‌توان نوشت. نشان دهید که $\lambda_a/\lambda_p = z_a/z_p$ و نیز نشان دهید که پذیرفتاری در دمای بالا به شکل $\chi = C/(T+\theta)$ است، که در آن θ با رابطهٔ زیر به دمای نیل T_N مربوط می‌شود.

$$\frac{\theta}{T_N} = \frac{\lambda_a + \lambda_p}{\lambda_a - \lambda_p} = \frac{z_a + z_p}{z_a - z_p}$$

سپس نشان دهید برای این ساختار fcc، $\theta/T_N = ۳$.

۸-۵ بر طبق مدل نیل، پذیرفتاری مغناطیسی موازی و عمودی یک پادفرومغناطیس را در دماهایی کمتر از دمای نیل حساب کنید.

۸-۶ شکل ۱۲-۱۰ نشانگر رابطهٔ پاشندگی مگنون برای آلیاژ کبالت fcc (Co ٪۹۲ و Fe ٪۸) است که در جهتهای مختلف اندازه‌گیری شده است. مقدار JS را به دست آورید و دلیلی برای متناهی بودن ω در $k = ۰$ پیشنهاد کنید

۸-۷ ظرفیت گرمایی دمای پایین $Y_۳\,Fe_۵\,O_{۱۲}$ (نارسنگ آهن ایتریوم)، در ترسیم $C/T^{۳/۲}$ برحسب $T^{۳/۲}$ یک خط مستقیم را نشان می‌دهد. چه اطلاعاتی از شیب و از

عرض از مبداء این خط می‌توان به دست آورد؟

۸-۸ مانند روشی که برای یک فرو مغناطیس در قسمت ۸-۵-۲ به کار رفت، نظریه‌ای برای امواج اسپینی در یک پادفرومغناطیس یک بعدی بیان کنید. فقط برهم کنشهای تبادلی نزدیکترین همسایگان را به حساب آورید و فرض کنید که اسپینهای واقع بر زیر شبکه‌های ↑ و ↓ را بتوان چنین نوشت

$$\mathbf{S}_{\mathbf{n}}^{\uparrow} = S\hat{\mathbf{z}} + \vec{\sigma}_n^{\uparrow} \quad \text{و} \quad \mathbf{S}_{n+1}^{\downarrow} = -S\hat{\mathbf{z}} + \vec{\sigma}_{n+1}^{\downarrow}$$

معادلات حرکت را برای اسپینهای ↑ و ↓ بنویسید و جوابهای به شکل زیر را اختیار کنید

$$\sigma_n^{\uparrow -} = \sigma_{n,x}^{\uparrow} - i\,\sigma_{n,y}^{\uparrow} = u\, e^{i(nka - \omega t)}$$

$$\sigma_{n+1}^{\downarrow -} = \sigma_{n+1,x}^{\downarrow} - i\sigma_{n+1,y} = \alpha\, u\, e^{i(nka - \omega t)}$$

(با معادلات (۲-۸) و (۲-۱۷) مقایسه کنید.) رابطهٔ پاشندگی را برای امواج اسپینی محاسبه کنید و نشان دهید که این رابطه برای k ی کوچک خطی است ($\omega \propto k$).

مفهوم این نتیجه در مورد ظرفیت گرمایی در دمای پایین چیست؟

۸-۹ نتایج تجربی نشان داده شده در شکل (۸-۱۲) بر روی یک لایهٔ کبالت با ضخامت تقریباً ۶۰۰ nm در ۹/۷ GHz حاصل شده‌اند. جرم مؤثر مگنونها در Co را تخمین بزنید. (به یاد داشته باشید که این نمودار نشانگر **مشتق** جذب است).

هیچ توجیه قانع‌کننده‌ای برای استفاده از جریانهای متناوب پرکشش، چه از نظر علمی و چه از نظر تجاری موجود نیست. این جریانها صرفاً به منظور کاهش سرمایه‌گذاری در سیم مسی و منابع واقعی به کار گرفته می‌شوند.

توماس ادیسون (۱۸۸۹)



خواص الکتریکی عایق‌ها

۹-۱ دی‌الکتریک‌ها

۹-۱-۱ ثابت دی‌الکتریک و پذیرفتاری

مواد **دی‌الکتریک *عایقهای الکتریکی*** [1] اند که پاسخ آنها در مقابل یک میدان الکتریکی ضعیف استاتیک یا کم بسامد به قرار زیر است

$$P = \varepsilon_\circ \chi E \qquad (۹\text{-}۱)$$

که در آن P قطبیدگی الکتریکی (گشتاور دو قطبی به ازای واحد حجم) و E مطابق قرارداد میدان الکتریکی **ماکروسکوپی** درون ماده است (برای بحثی در بارهٔ میدانهای الکتریکی درون ماده پیوست ب را ببینید). مقایسه با معادلهٔ (۷-۱) نشان می‌دهد که دی‌الکتریکها به دیامغناطیسها و پارامغناطیسها شباهت دارند؛ ولی چون پذیرفتاری بدون بعد استاتیک χ در دی‌الکتریکها همواره مثبت است، اگر آنها را پاراالکتریک می‌نامیدند سازگاری بیشتری با مغناطیس حاصل می‌شد. مواد **پیروالکتریک** (که مواد **فروالکتریک** زیر مجموعه‌ای از آنها هستند) در غیاب میدان اعمالی دارای قطبیدگی الکتریکی لحظه‌ای هستند؛ در بخش ۹-۲ به بحث در مورد این

۱- پاسخ یک مادهٔ رسانا در مقابل میدان الکتریکی کم بسامد به طور عمده از حاملهای بار متحرک ناشی می‌شود. (بخش ۱۳-۶ را ببینید)

مواد می‌پردازیم.

پذیرفتاری الکتریکی یک دی‌الکتریک معمولاً بسیار بزرگتر از پذیرفتاری مغناطیسی است، و در دمای اتاق از مرتبهٔ یک یا بیشتر است. معادلهٔ (۹-۱) پذیرفتاری را در SI تعریف می‌کند؛ همانند حالت مغناطیسی، خواننده احتمالاً با جدولهایی از پذیرفتاری در cgs روبه‌رو می‌شود که این دو، طبق رابطهٔ زیر (معادله (۷-۲)) به یکدیگر مربوط می‌شوند.

$$\chi_{SI} = 4\pi\,\chi_{cgs}$$

ما تنها دی‌الکتریکهایی را بررسی می‌کنیم که در آنها $\mathbf{P}$ و $\mathbf{E}$ موازی‌اند و در نتیجه χ یک کمیت نرده‌ای است؛ بلورهای با تقارن مکعبی دارای این خاصیت هستند. گذردهی نسبی (ثابت دی‌الکتریک) ε با رابطهٔ زیر به پذیرفتاری مربوط می‌شود.

$$\chi = \varepsilon - 1 \qquad \textbf{(۹-۲)}$$

برای تعیین یک مقدار نظری برای پذیرفتاری ابتدا باید گشتاور دو قطبی حاصل از میدان اعمالی $\mathbf{E}$ در یک اتم منزوی را محاسبه کرد.

$$\mathbf{p} = \alpha\,\mathbf{E} \qquad \textbf{(۹-۳)}$$

α **قطبش پذیری** اتم نامیده می‌شود. اگر رفتار اتمها با قرار گرفتن آنها در بلور تغییر چندانی نکند در آن صورت قطبیدگی جامد با جمع‌زدن معادلهٔ (۹-۳) بر روی N اتم موجود در واحد حجم به دست می‌آید

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{i}=1}^{\mathbf{N}} \mathbf{p}_i = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i\,\mathbf{E}_{Li} \qquad \textbf{(۹-۴)}$$

که در آن شاخص i به اتم iام مربوط می‌شود و $\mathbf{E}_{Li}$ میدان الکتریکی **موضعی** در مکان این اتم است. برای به دست آوردن پذیرفتاری باید رابطه بین میدانهای الکتریکی موضعی و ماکروسکوپی را محاسبه کنیم، این رابطه به ترتیب اتمها در درون بلور بستگی دارد. سرراست‌ترین وضعیت برای اتمی حاصل می‌شود که در مکانی با تقارن مکعبی درون بلوری قرار گیرد که اتمهای آن دارای گشتاورهای دو قطبی مستقل از زمان و نقطه مانند باشند. در این صورت میدان موضعی در مرکز اتم با **رابطهٔ لورنتس** (پیوست ب، معادلهٔ (ب-۳۱)) بیان می‌شود

$$\mathbf{E}_L = \mathbf{E} + \frac{\mathbf{P}}{3\varepsilon_0} \qquad \textbf{(۹-۵)}$$

لذا میدان موضعی بر روی تمامی این‌گونه اتمها یکسان است. با به کار بردن معادلات (۹-۱)،

(۹-۲)، (۹-۴) و (۹-۵)، رابطه‌های زیر بین ε ، χ و قطبش پذیریهای اتمی به دست می‌آید.

$$\frac{\chi}{\chi+3} = \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \qquad (9\text{-}6)$$

این رابطهٔ **کلوزیوس - موسوتی** است. رابطهٔ لورنتس (معادلهٔ ۹-۵)، میدان موضعی میانگین در مکان یک اتم یا مولکول در ترتیب کاتوره‌ای را نیز مشخص می‌کند؛ بنابراین رابطهٔ کلوزیوس - موسوتی را برای گازها، مایعات و بلورهای بی‌شکل نیز می‌توان به کار برد.
این رابطه برای گازها خوب کار می‌کند اما، همان گونه که در بخش ۹-۱-۳ خواهیم دید، در به کارگیری آن در دستگاههای با چگالی زیاد باید احتیاط بیشتری اعمال شود.

در بخشهای زیر به بحث در مورد سه سازوکاری که به قطبیدگی بلور توسط میدان الکتریکی منجر می‌شوند می‌پردازیم؛ جابه‌جایی نسبی الکترونها و هسته در هر یک از اتمها؛ ستمگیری گشتاورهای دو قطبی دائمی مولکولها در جامدات مولکولی؛ و جابه‌جایی نسبی یونهای مثبت و منفی در جامدهای یونی.

معادلات (۹-۱) و (۹-۶) را می‌توان برای توصیف پاسخ یک دی‌الکتریک در مقابل میدان الکتریکی متناوب، $\mathbf{E}_0\, e^{i\omega t}$ نیز، به کاربرد، ولی ثابت دی‌الکتریک و پذیرفتاری به بسامد ω بستگی دارند و عموماً مختلط‌اند؛ بخش موهومی ε وجود اتلاف را نشان می‌دهد، این موضوع را می‌توان با نوشتن ε به صورت زیر دید

$$\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon'' \qquad (9\text{-}7)$$

جریان جابه‌جایی ماکسولی حاصل به قرار زیر است

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{D}} &= \varepsilon\varepsilon_0 \dot{\mathbf{E}} = \varepsilon_0 (\varepsilon' + i\varepsilon'')\dot{\mathbf{E}} \\ &= \varepsilon_0 \varepsilon' i\omega \mathbf{E} - \varepsilon_0 \varepsilon'' \omega \mathbf{E} \end{aligned} \qquad (9\text{-}8)$$

اولین جمله با میدان اعمالی 90° اختلاف فاز دارد، لذا واکنشی است. دومین جمله با میدان همفاز و بنابراین مقاومتی است. اتلاف میانگین مربوط به جملهٔ مقاومتی به ازای واحد حجم برابر است با

$$<\dot{\mathbf{D}}.\mathbf{E}> = -\varepsilon_0\varepsilon''\omega E_0^2 <\cos^2(\omega t)> = -\frac{1}{2}\varepsilon_0\varepsilon''\omega E_0^2$$

این اتلاف باید مثبت باشد، از این رو ε'' منفی است. دو جملهٔ معادلهٔ (۹-۸) را می‌توان روی

یک نمودار فاز - بردار، نظیر شکل ۹-۱ نمایش داد: کیفیت دی‌الکتریک با **تانژانت اتلاف** مشخص می‌شود، که عبارت است از نسبت جملهٔ اتلافی به جملهٔ واکنشی و بنابراین مساوی تانژانت زاویهٔ δ در شکل ۹-۱ است. از این رو داریم

$$\text{تانژانت اتلاف} = \tan\,\delta = -\frac{\varepsilon''}{\varepsilon'} \qquad (۹-۹)$$

ضریب شکست تابع بسامد $n(\omega)$ برای عبور موج الکترومغناطیسی از درون جامد با رابطهٔ پاشندگی زیر تعریف می‌شود.

$$\frac{\omega}{k} = \frac{C}{n(\omega)} \qquad (۱۰-۹)$$

که در آن $n(\omega)$ و $\varepsilon(\omega)$ با رابطهٔ زیر (مسئله ۹-۱) به یکدیگر مربوط می‌شوند[1].

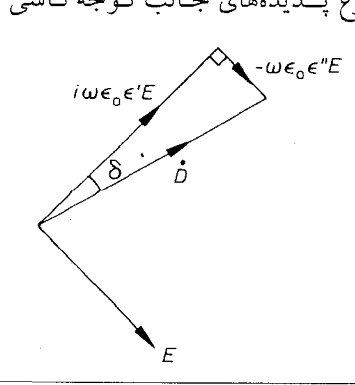
$$n(\omega) = [\varepsilon(\omega)]^{\frac{1}{2}} \qquad (۱۱-۹)$$

اگر $\varepsilon(\omega)$ مختلط باشد، $n(\omega)$ نیز مختلط خواهد بود.

در میدانهای الکتریکی بسیار قوی که در یک باریکهٔ لیزری کانونی شده رخ می‌دهند ($\approx 10^{10}\ Vm^{-1}$)، معادلهٔ (۹-۱) نارساست و باید با رابطهٔ زیر تعویض شود:

$$\mathbf{P} = a\mathbf{E} + b\,\mathbf{E}^{2} + c\mathbf{E}^{3} + \ldots \qquad (۱۲-۹)$$

برای بلورهای با یک مرکز تقارن، ضریب b حذف می‌شود زیرا میدانهای مساوی و مخالف $\mathbf{E}$ و $\mathbf{E}$- باید قطبیدگیهای مساوی و مخالف ایجاد کنند. دانش **اپتیک غیرخطی** به وجود جملات با مرتبه‌های بالاتر در معادلهٔ (۹-۱۲) بستگی دارد. با توجه به این نکته که جملهٔ مربعی نشانگر آن است که یک میدان الکتریکی با بسامد ω، سهمی در قطبیدگی ایجاد خواهد کرد که در بسامد 2ω تغییر می‌کند، می‌توانیم بینشی از نوع پدیده‌های جالب توجه ناشی از این



شکل ۹-۱: رابطهٔ فازی سهمهای واکنشی و مقاومتی در جریان جابه‌جایی $\dot{\mathbf{D}}$ برحسب $\mathbf{E}$. توجه کنید که ε'' منفی است.

۱- فرض می‌کنیم که جامد غیر مغناطیسی است یعنی $\mu=1$.

جملات به دست آوریم. بلور در این بسامد تابش مجدد می‌کند، و لذا به منزله یک چشمهٔ تابش با بسامدی دو برابر بسامد لیزر اولیه عمل می‌کند[1].

۹-۱-۲ قطبیدگی ناشی از حرکت نسبی الکترونها و هسته‌ها

مرتبهٔ بزرگی قطبش‌پذیری یک اتم را می‌توانیم با این فرض که Z الکترون داخل اتم در کره‌ای به شعاع r با چگالی یکنواخت توزیع شده‌اند برآورد کنیم. جابه‌جایی هسته از مرکز کره به اندازهٔ فاصلهٔ x به آن معناست که هسته تحت اثر یک میدان الکتریکی بازگرداننده ناشی از الکترونهای درون کرهٔ با شعاع x است (شکل ۹-۲)؛ بار درون کره برابر با $-Ze\left(\frac{x}{r}\right)^{3}$ است، بنابراین میدان برابر است با

$$E = -\frac{Ze\left(\frac{x}{r}\right)^{3}}{4\pi\varepsilon_{0}x^{2}} = -\frac{Zex}{4\pi\varepsilon_{0}r^{3}} \tag{۹-۱۳}$$

میدان الکتریکی اعمالی $\mathbf{E}_L$ تا زمانی باعث جابه‌جایی نسبی الکترونها و هسته خواهد شد که میدان بازگرداننده با میدان اعمالی موازنه شود، $\mathbf{E}+\mathbf{E}_L=0$. معادلهٔ (۹-۱۳) گشتاور دو قطبی الکتریکی حاصل در اتم را مشخص می‌کند.

$$\mathbf{p} = Ze\mathbf{x} = 4\pi\varepsilon_{0}\, r^{3}\mathbf{E}_{L} \tag{۹-۱۴}$$

مقایسه با معادلهٔ (۹-۳)، قطبش‌پذیری اتمی را با رابطهٔ زیر مشخص می‌کند[2].

$$\frac{\alpha}{4\pi\varepsilon_{0}} = r^{3} \approx 10^{-30} m^{-3} \tag{۹-۱۵}$$

۹-۲: مدل اتمی که در آن Z الکترون در کره‌ای به شعاع r به طور یکنواخت توزیع شده‌اند. جابه‌جایی هسته به اندازهٔ فاصلهٔ x مطابق شکل به آن معناست که هسته تحت‌تأثیر نیروی بازگردانندهٔ ناشی از الکترونهای‌درون‌کرهٔ به شعاع x قرار می‌گیرد. الکترونهای خارج این کره سهمی ندارند چون‌میدان‌الکتریکی درون پوستهٔ‌کروی‌با باریکنواخت صفر است.

۱- اطلاعات بیشتر در مورد کاربرد فیزیک حالت جامد در اپتیک غیرخطی را می‌توان در کتاب دالون [13] به دست آورد.

۲- اگر رفتار اتم نظیر یک کرهٔ کاملاً رسانا به شعاع r در نظر گرفته شود دقیقاً همین مرتبهٔ بزرگی، برای قطبش‌پذیری برآورد می‌شود. نتیجه را از آن رو بر $4\pi\varepsilon_0$ تقسیم کرده‌ایم که مقادیر قطبیدگی برحسب m^3 به دست آید تا مستقیماً با مقادیر cgs برحسب cm^3 قابل مقایسه باشد.

که برآورد عددی را با فرض $r \approx ۱\text{Å}$ به دست آورده‌ایم. جدول ۹-۱ مقادیر اندازه‌گیری شدهٔ $\alpha/۴\pi\varepsilon_{\circ}$ برای اتمها و مولکولهای مختلف، همراه با مقدار r حاصل از معادلهٔ (۹-۱۵) را نشان می‌دهد؛ سازگاری با مرتبهٔ بزرگی برآورد شده منطقی است. محاسبهٔ مکانیک کوانتومی دقیقتر α را می‌توان با به کارگیری نظریهٔ اختلال مرتبهٔ دوم انجام داد.

وقتی که هم قطبش پذیریهای اتمی و هم رابطهٔ بین میدانهای الکتریکی ماکروسکوپی و موضعی معلوم باشد، می‌توان ثابت دی‌الکتریک مایعات و جامدات را محاسبه کرد. برای ترتیب کاتوره‌ای اتمها یا مولکولها در مایع، رابطهٔ میدان موضعی لورنتس (معادلهٔ (۹-۵)) و در نتیجه رابطهٔ کلوزیوس - موسوتی (معادلهٔ (۹-۶)) را می‌توان به کاربرد. اعتبار این رهیافت با جدول ۹-۱ آزموده می‌شود، که نشان می‌دهد سازگاری خوبی بین مقادیر تجربی و مقادیر پیش‌بینی شده برای ثابت دی‌الکتریک مایعات مختلف در نقاط جوش متعارف آنها وجود دارد. قطبش‌پذیری مولکولی به کار گرفته شده در این محاسبات از اندازه‌گیریهای فاز گازی حاصل شده است که در آن تصحیح مربوط به میدان موضعی خیلی کوچک است.

رابطهٔ کلوزیوس - موسوتی را می‌توان برای موردی که اتمها در مکانهای با تقارن مکعبی باشند نیز به کار برد؛ جدول ۹-۲ مقادیر تجربی و پیش‌بینی‌شدهٔ ثابت دی‌الکتریک بلورهای هالوژنید قلیایی مکعبی را با هم مقایسه می‌کند. مقادیر تجربی ε در بسامد ($\nu = ۵\times ۱۰^{۱۴}\,Hz$) خطوط D در طیف اتمی سدیم هستند؛ در این بسامد سهم حرکت یونی (بخش ۹-۱-۴) در ε

جدول ۹-۱ : مقایسهٔ مقادیر مشاهده شدهٔ پذیرفتاری الکتریکی مایعات مختلف در نقطهٔ جوش متعارف آنها با مقادیر پیش‌بینی شده توسط معادلهٔ کلوزیوس - موسوتی (۹-۶). قطبش‌پذیری اتمی یا مولکولی به کار رفته برای به‌دست آوردن مقدار پیش‌بینی‌شده‌ازاندازه‌گیریهای پذیرفتاری در فاز گازی استخراج شده است.

اتم یا مولکول	قطبیدگی $\frac{\alpha}{۴\pi\varepsilon_{\circ}}$ $(۱۰^{-۳۰}m^{۳})$	شعاع مؤثر $\left(\frac{\alpha}{۴\pi\varepsilon_{\circ}}\right)^{۱/۳}$ (Å)	چگالی تعداد در مایع $(۱۰^{-۲۸}m^{-۳})$	ثابت دی‌الکتریک مایع: پیش‌بینی‌شده	ثابت دی‌الکتریک مایع: مشاهده شده
He	۰/۲۰۶	۰/۵۹	۱/۸۸۰	۱/۰۴۹	۱/۰۴۸
Ar	۱/۶۴	۱/۱۸	۲/۱۲۸	۱/۵۱۴	۱/۵۳۸
$H_{۲}$	۰/۸۰۷	۰/۹۳	۲/۱۱۴	۱/۲۳۱	۱/۲۲۸
$O_{۲}$	۱/۵۷	۱/۱۶	۲/۱۴۳	۱/۴۹۲	۱/۵۰۷
$N_{۲}$	۱/۷۴	۱/۲۰	۱/۷۳۷	۱/۴۳۵	۱/۴۵۴

(داده‌ها با کسب اجازه از کتاب زیر گرفته شده‌اند:
Handbook of Chemistry and Physics, 61st edn. Copyright CRC Press Inc., Boca Raton, Florida)

جدول ۹-۲: مقایسهٔ ثابت دی‌الکتریک اندازه‌گیری شده (مقدار بالایی) و پیش‌بینی شده (مقدار پایینی) در بلورهای هالوژنید قلیایی. قطبش‌پذیریهای یونی به کار برده شده در محاسبه، ($\alpha/۴\pi\varepsilon_۰$) که بعد از نماد شیمیایی هر عنصر مشخص شده‌اند به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که بهترین برازش ممکن بین مقادیر اندازه‌گیری شده و مقادیر پیش‌بینی‌شده حاصل شود. مقادیر مشاهده شده در بسامد خطوط D در طیف اتمی سدیم اندازه‌گیری شده‌اند.

کاتیون‌ها $\left(\frac{\alpha}{۴\pi\varepsilon_۰}\right)$	انیون‌ها $\left(\frac{\alpha}{۴\pi\varepsilon_۰}\right)$			
	F^- (۰/۶۴۴ Å^۳)	Cl^- (۲/۹۶۰ Å^۳)	Br^- (۴/۱۵۸ Å^۳)	I^- (۶/۴۳۱ Å^۳)
Li^+	۰/۹۲۰	۲/۹۸۰	۴/۱۵۹	۶/۲۴۸
(۰/۰۲۹ Å^۳)	۰/۶۷۳	۲/۹۸۹	۴/۱۸۷	۶/۴۵۹
Na^+	۱/۱۸۶	۳/۳۶۰	۴/۵۶۰	۶/۷۲۱
(۰/۴۰۸ Å^۳)	۱/۰۵۳	۳/۳۶۸	۴/۵۶۶	۶/۸۳۹
K^+	۱/۹۶۶	۴/۲۷۲	۵/۵۰۸	۷/۷۹۰
(۱/۳۳۴ Å^۳)	۱/۹۸۱	۴/۲۹۷	۵/۴۹۵	۷/۷۶۷
Rb^+	۲/۵۷۲	۴/۸۵۶	۶/۱۴۷	۸/۵۳۲
(۱/۹۷۹ Å^۳)	۲/۶۲۳	۴/۹۳۹	۶/۱۳۷	۸/۴۰۹
Cs^+	۳/۶۶۴	۶/۴۱۹	۷/۴۹۷	۹/۹۵۲
(۳/۳۳۵ Å^۳)	۳/۹۷۹	۶/۲۹۵	۷/۴۹۳	۹/۷۶۵

اقتباس از:

J.R. Tessmann, A. H. Kahn and W.Shockley, Phys. Rev. **92**, *890 (1953)*

قابل چشم‌پوشی است. مقادیر قطبش پذیری یونی به کار رفته در جدول مشخص شده‌اند، این مقادیر به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که برازش خوبی بین مقادیر تجربی و محاسبه شدهٔ ε حاصل شود؛ برازش، بجز برای فلوریدها بهتر از حدود ۳٪ است.

قسمتی از اختلاف اندک بین مقادیر تجربی، با مقادیر برازش یافته ناشی از آن است که قطبش‌پذیری یک یون به ترتیب الکترونهای آن و در نتیجه به محیط در برگیرندهٔ آن بستگی دارد؛ برای بلورهای یونی این اثر نسبتاً کوچکی است، چراکه در این بلورها، تشکیل بلور تأثیر اندکی بر ترتیب الکترونی اتمها دارد. وقتی یک بلور با پیوند کووالانی تشکیل می‌شود اثر بر الکترونها بسیار بیشتر است و به کارگیری قطبش‌پذیری اتم منزوی مقدار خوبی برای ثابت دی‌الکتریک

جامد نمی‌دهد. تشکیل پیوندهای کووالانی بیشترین تأثیر را روی بیرونی‌ترین الکترونها دارند، و به علت وابستگی r^3 در معادلهٔ (۹-۱۵) همین الکترونها بزرگترین تأثیر را در قطبش‌پذیری دارند. ثابتهای دی‌الکتریک بزرگ در الماس، سیلیسم و ژرمانیوم نشانگر وجود چگالی قابل توجه الکترونی در فواصلی از هسته است و این چگالی را می‌توان به الکترونهای درگیر در تشکیل پیوندهای کووالانی نسبت داد. در محاسبهٔ ثابت دی‌الکتریک مناسب این مواد باید آثار ساختار نواری نیز منظور شوند.

برای آنکه نحوهٔ وابستگی قطبش‌پذیری اتمی، ناشی از جابه‌جایی نسبی الکترونها و هسته‌ها، به بسامد را بررسی کنیم می‌توانیم مدل اتمی سادهٔ شکل ۹-۲ را به کار بریم. این مدل یک نیروی بازگردانندهٔ متناسب با جابه‌جایی را پیش‌بینی می‌کند (معادلهٔ (۹-۱۳)) و در نتیجه پیشنهاد می‌کند که پاسخ الکترونها در مقابل میدان متناوب $\mathbf{E}_L = \mathbf{E}_0 e^{i\omega t}$ باید با معادلهٔ نوسانگر هماهنگ سادهٔ زیر توصیف شود

$$Zm\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} + Zm\,\gamma\frac{d\mathbf{x}}{dt} + \frac{Z^2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\,\mathbf{x} = ZeE_0\,e^{i\omega t} \qquad (۹\text{-}۱۶)$$

عبارت مربوط به نیروی بازگرداننده از معادلهٔ (۹-۱۳) به دست آمده است. یک جملهٔ اتلافی $Zm\,\gamma\,d\mathbf{x}/dt$ به این معادله افزوده‌ایم که بعداً در بارهٔ منشاء آن بحث می‌کنیم.

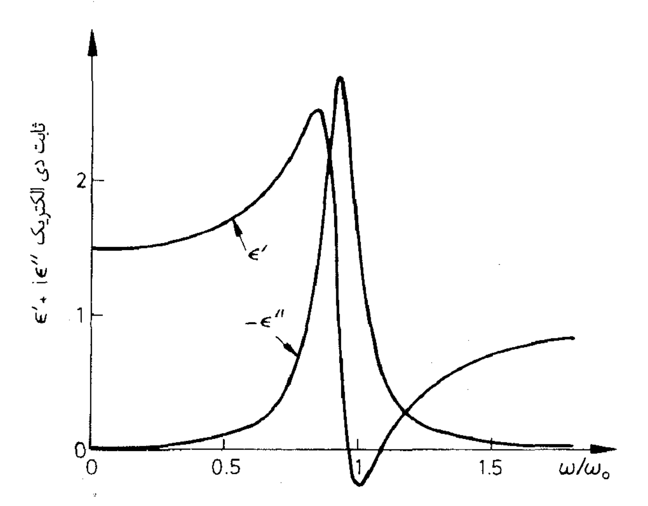
جواب معادلهٔ (۹-۱۶) عبارت است از :

$$\mathbf{x} = \frac{e}{m(\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega\gamma)}\,\mathbf{E}_0\,e^{i\omega t} \qquad (۹\text{-}۱۷)$$

که در آن

$$\omega_0 = \left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^3 m}\right)^{1/2} \qquad (۹\text{-}۱۸)$$

بسامد تشدید «طبیعی» در مدل اتمی ماست. گشتاور دو قطبی $Ze\mathbf{x}$ و قطبش‌پذیری وابسته به بسامد را می‌توان با همان روشی که در مورد میدان ایستا عمل شد (معادله‌های (۹-۱۴) و (۹-۱۵) به دست آورد. پاسخ اتم برای میرایی ضعیف، یک تشدید تیز در بسامد ω_0 است. شکل ۹-۳ رفتار ثابت دی‌الکتریک را که با به کاربردن رابطهٔ کلوزیوس - موسوتی حاصل شده است نشان می‌دهد (معادلهٔ (۹-۶)). در بسامدهای پایین، $\omega \ll \omega_0$، بخش حقیقی ε' به مقدار ایستا که از معادلهٔ (۹-۱۵) پیروی می‌کند میل می‌کند و در بسامدهای بالا مطابق رابطهٔ زیر از طرف پایین به طرف



شکل ۹-۳: تغییر بخشهای حقیقی و موهومی ثابت دی‌الکتریک، ε' و ε''، با بسامد که توسط معادلات (۹-۱۴) و (۹-۱۷) پیش‌بینی می‌شود رابطهٔ کلوزیوس-موسوتی (معادلهٔ (۹-۶)) برای مربوط ساختن قطبش‌پذیری اتمی به ثابت دی‌الکتریک به کار برده شده است. تصحیح میدان موضعی موجود در این رابطه باعث بروز قله در جذب (ε'') در بسامدی درست زیر ω_0 می‌شود. در ناحیه‌ای از بسامد که در آن ε' منفی است، امواج فرودی بر بلور تماماً بازتاب خارجی می‌یابند (بخش ۹-۱-۴ را ببینید).

یک میل می‌کند:

$$\varepsilon' = 1 - \frac{NZe^2}{\varepsilon_0 m\omega^2} \qquad (۹\text{-}۱۹)$$

که در آن N تعداد اتمها به ازای واحد حجم است. در بخش ۱۳-۶ نشان می‌دهیم که ثابت دی‌الکتریک برای الکترونهای آزاد در بسامدهای بالا نیز با معادلهٔ (۹-۱۹) داده می‌شود، و این نشان می‌دهد که در بسامدهای بالا الکترونها در تمام مواد همچون ذرات آزاد رفتار می‌کنند. قلهٔ تیز در بخش مولکولی ثابت دی‌الکتریک، ε''، نشانگر جذب تشدیدی انرژی است که در مجاورت ω_0 رخ می‌دهد.

اگر با استفاده از جدول ۹-۱ به این نکته توجه کنیم که r از مرتبهٔ $2a_0$ است، (a_0 شعاع بوهر است) تعبیر فیزیکی بسامد تشدیدی ω_0 آشکار می‌شود. مشخص می‌شود که انرژی $\hbar\omega_0$ به انرژی بستگی یک اتم تک الکترونی با هسته‌ای با بار Ze نزدیک است (مسئلهٔ ۹-۳)؛ در نتیجه بسامد ω_0 همانند ترازهای انرژی الکترونی در اتم است. محاسبهٔ مکانیک کوانتومی قطبش‌پذیری یک اتم چندین تشدید را پیش‌بینی می‌کند، که هر یک در بسامدی مربوط به گذار

بین ترازهای انرژی الکترونی اتم رخ می‌دهند؛ رفتار کیفی ثابت دی‌الکتریک در هر تشدید مشابه رفتاری است که در شکل ۹-۳ نمایش داده شده است. رفتار حدی در بسامدهای بالا که با معادلهٔ (۹-۱۹) داده می‌شود تنها در بسامدهای بالاتر از بیشترین بسامدهای تشدیدی حاصل می‌شود، که معمولاً در ناحیهٔ با طول موج بلند طیف پرتوهای X است. قلهٔ اتلافی همراه هر تشدید مربوط به جذب تشدیدی فوتونها توسط الکترونهایی است که گذار متناظر را انجام می‌دهند.

۹-۱-۳ سمتگیری گشتاورهای دو قطبی دائمی

مولکولهای بدون مرکز تقارن دارای گشتاور دو قطبی دائمی هستند و آنها را **قطبی** می‌گویند. انرژی برهم‌کنش گشتاور دو قطبی $\mathbf{P}$ با میدان الکتریکی $\mathbf{E}_L$ یعنی

$$E = -\mathbf{P} \cdot \mathbf{E}_L \qquad (۹\text{-}۲۰)$$

مایل است که گشتاور را در سمت موازی میدان قرار دهد. اگر رفتار دو قطبیها مستقل از یکدیگر باشد، همسویی نهایی آنها با میدان توسط بی‌نظمی گرمایی محدود می‌شود و احتمال $P(\theta)$ برای آن که یک دو قطبی زاویهٔ θ با میدان $\mathbf{E}_L$ بسازد با ضریب بولتزمن تعیین می‌شود

$$P(\theta) \propto exp\left(\frac{-E}{k_B\ T}\right) = exp\left(+\frac{\mathbf{P} \cdot \mathbf{E}_L}{k_B\ T}\right) = exp\left[\frac{(PE_L\ cos\,\theta)}{k_B\ T}\right] \qquad (۹\text{-}۲۱)$$

معادلهٔ (۹-۲۱) مایعات و گازهای قطبی را به خوبی توصیف می‌کند. ولی، در جامدات نمی‌توان انرژی پتانسیل ناشی از برهم کنش بین یک دو قطبی و همسایگان آن را نادیده گرفت. این برهم کنش می‌تواند مانع چرخش آزاد مولکولها شود و گاهی آن را کاملاً حذف می‌کند (بخش ۹-۲ را ببینید)؛ جایی که چرخش مجاز باشد، این چرخش غالباً بین یک جهت ترجیحی و جهت ترجیحی دیگر است. برای آن که یک برداشت تقریبی از آنچه باید انتظار داشته باشیم، به دست آوریم با اغماض از این محدودیت، فرض می‌کنیم که بتوانیم با به کار بردن ضریب بولتزمن (معادلهٔ (۹-۲۱)) میانگین مؤلفهٔ موازی با میدان گشتاور دو قطبی یعنی $\overline{P}_{\|}$ را تعیین کنیم.

بنابراین

$$\overline{p}_{\|} = \langle p\, cos\,\theta \rangle = p \langle cos\,\theta \rangle$$

$$= P\frac{\int_0^{\pi} cos\,\theta\, exp\left[(pE_L\ cos\,\theta)/k_B\,T\right]\ 2\pi\, sin\,\theta\, d\theta}{\int_0^{\pi} exp\left[(pE_L\ cos\,\theta)/k_B\,T\right]\ 2\pi\, sin\,\theta\, d\theta}$$

ضریب $2\pi \sin\theta$ یک عامل وزن زاویه فضایی است که در شکل ۹-۴ نشان داده شده است. با تغییر متغیر $u = \cos\theta$ برای محاسبه انتگرالها داریم

$$\overline{p}_{\|} = p\frac{\int_{-1}^{+1} ue^{ux}\, du}{\int_{-1}^{+1} e^{ux}\, du} \tag{۹-۲۲}$$

که در آن $x = p\,\frac{E_L}{k_B\,T}$ مقیاس بدون بعدی برای شدت میدان الکتریکی است. یک روش عمل ماهرانه توجه به این نکته است که معادلهٔ (۹-۲۲) را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\overline{p}_{\|} = p\,\frac{1}{I}\,\frac{dI}{dx} = p\,\frac{d\ln I}{dx}$$

که در آن

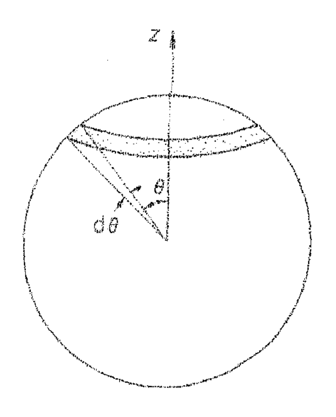
$$I = \int_{-1}^{+1} e^{ux}\, du = \left[\frac{1}{x}\, e^{ux}\right]_{-1}^{+1} = \frac{2\sinh x}{x}$$

بنابراین

$$\overline{P}_{\|} = p\left(\coth x - \frac{1}{x}\right) = pL(x) \tag{۹-۲۳}$$

تابع لانژون $L(x)$، که با معادلهٔ فوق تعریف می‌شود حد تابع بریلوئن معادلهٔ (۷-۱۶) به ازای J نامتناهی است؛ این نتیجه مناسب است چون یک اندازه حرکت زاویه‌ای بزرگ می‌تواند تقریباً در هر جهتی باشد و لذا مشابه یک دو قطبی الکتریکی با چرخش آزاد رفتار می‌کند.

به کاربردن مقادیر نوعی $10^{-29}\ C\ m$ برای گشتاور دو قطبی دائمی (معادل جابه‌جایی



شکل ۹-۴: حلقهٔ سایه‌زده شده بر روی سطح کرهٔ با شعاع واحد برابر زاویهٔ فضایی برای تمامی جهت‌های ممکن بین θ و $\theta + d\theta$ از محور z است. محیط حلقه $2\pi \sin\theta$ و مساحت آن $2\pi \sin\theta\, d\theta$ است.

یک بار الکترونی به مقدار $\overset{\circ}{A}$ ۰/۶) و $10^{7}\ Vm^{-1}$ برای بزرگترین میدان الکتریکی که می‌توان بر یک جامد اعمال کرد بدون آن که فرو شکست رخ دهد، مقدار $x \approx 0/02$ در دمای اتاق حاصل می‌شود. چون در دماهای به مراتب پایین‌تر معمولاً چرخش مولکولی وجود ندارد، حد مقادیر کوچک x در معادلهٔ (۹-۲۳) مناسب است؛ با به کار بردن $coth \approx 1/x + x/3 + \dots$ داریم.

$$\overline{P}_{\parallel} \approx \frac{p^{2} E_L}{3k_B\ T}$$

قطبش پذیری اتمی معادل که توسط معادلهٔ (۹-۳) تعریف شده است به قرار زیر است.

$$\alpha = \frac{p^{2}}{3k_B\ T} \qquad (۲۴\text{-}۹)$$

این وابستگی α با $\frac{1}{T}$ معادل الکتریکی قانون کوری در مغناطیس است (معادلهٔ (۷-۱۸)).
با به کار بردن $p \approx 10^{-29}\ C\ m$ در می‌یابیم که در $T = 300\ K$

$$\frac{\alpha}{4\pi\varepsilon_0} \approx 10^{-28}\ m^{-3} \qquad (۲۵\text{-}۹)$$

از آن رو بر $4\pi\varepsilon_0$ تقسیم کرده‌ایم که مقایسهٔ آن با معادلهٔ (۹-۱۵) ساده‌تر باشد؛ بنابراین می‌بینیم که قطبش پذیری‌های سمتی معمولاً بسیار بزرگتر از قطبش پذیری‌های مربوط به جابه‌جایی نسبی الکترونها و هسته در اتمهاست.

رابطهٔ کلوزیوس - موسوتی (معادلهٔ (۹-۶)) برای چنین مقادیر بزرگی از α غالباً نتایج نادرستی ارائه می‌کند. برای مشاهدهٔ این موضوع مثال آب را به کار می‌بریم[1]. با معکوس کردن معادلهٔ (۹-۶) ثابت دی‌الکتریک را به دست می‌آوریم

$$\varepsilon = \frac{2\sum \frac{\alpha_i}{\varepsilon_0} + 3}{3 - \frac{\sum \alpha_i}{\varepsilon_0}} \qquad (۲۶\text{-}۹)$$

این رابطه نشان می‌دهد که ε به ازای $\sum \frac{\alpha_i}{\varepsilon_0} \to 3$ واگرا و به ازای $\frac{\sum \alpha_i}{\varepsilon_0} > 3$ منفی می‌شود.
گشتاور دو قطبی دائمی مولکول آب برابر $0/62 \times 10^{-29}\ C\ m$ و چگالی مولکولی آب $4 \times 10^{28}\ m^{-3}$ است، لذا در دمای $T = 300\ K$ داریم $\sum \alpha_i / \varepsilon_0 = 12$. ولی، ثابت دی‌الکتریک ایستای اندازه‌گیری شده مثبت است ($\varepsilon \approx 80$). شکست معادلهٔ (۹-۲۶) نشانگر آن است که رابطهٔ میدان موضعی لورنتس (معادلهٔ (۹-۵)) در توصیف میدان

۱- رابطهٔ کلوزیوس - موسوتی را نمی‌توان برای یخ به کار برد چون مولکولها در یخ در مکانهای با تقارن مکعبی نیستند.

الکتریکی بزرگ وابسته به فضا و زمان در مجاورت یک مولکول قطبی ناتوان است.

آهستگی چرخش مولکولی در جامدات به آن معناست که در یک بسامد پایین سهم سمتگیری در ثابت دی‌الکتریک در مقایسه با سهم ناشی از جابه جایی نسبی الکترونها و هسته‌ها که دربخش قبل بحث شد ناچیز است. دبی به کارگیری **معادلهٔ واهلش** زیر را برای محاسبهٔ پذیرفتاری وابسته به بسامد $\chi(\omega)$ در مایعات حاوی مولکولهای قطبی پیشنهاد کرد.

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \frac{\mathbf{P}_E - \mathbf{P}}{\tau} \tag{۲۷-۹}$$

$\mathbf{P}_E$ مقدار تعادلی قطبیدگی برای یک میدان ایستا با مقداری مساوی با میدان اعمالی لحظه‌ای است؛ بنابراین $\mathbf{P}_E = \chi(0)\varepsilon_0 \mathbf{E}$، که در آن $\chi(0)$ پذیرفتاری ایستاست. معنای فیزیکی معادلهٔ (۹-۲۷) آن است که قطبیدگی همواره با آهنگی که با **زمان واهلش** τ تعیین می‌شود به سمت مقدار لحظه‌ای تعادلی خود میل می‌کند (وامی‌هلد)؛ انتظار داریم که τ مقیاس زمانی چرخش مولکولی را نشان دهد. فرض خواهیم کرد که معادلهٔ (۹-۲۷) برای توصیف مولکولهای قطبی در جامدات نیز به کار رود.

با انتخاب $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\omega t}$ در می‌یابیم که معادلهٔ (۹-۲۷) دارای جواب زیر است

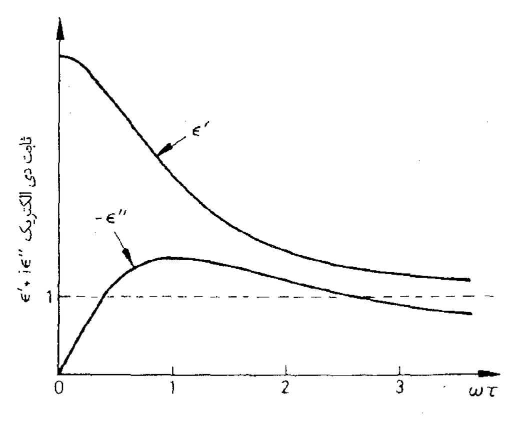
$$\mathbf{P} = \frac{\varepsilon_0 \chi(0)}{1 + i\omega\tau} \mathbf{E}_0 e^{i\omega t}$$

که از این رابطه، و با به کارگیری معادلات (۹-۱) و (۹-۲)، $\chi(\omega)$ و در نتیجه $\varepsilon(\omega)$ را می‌توان استنتاج کرد. بنابراین

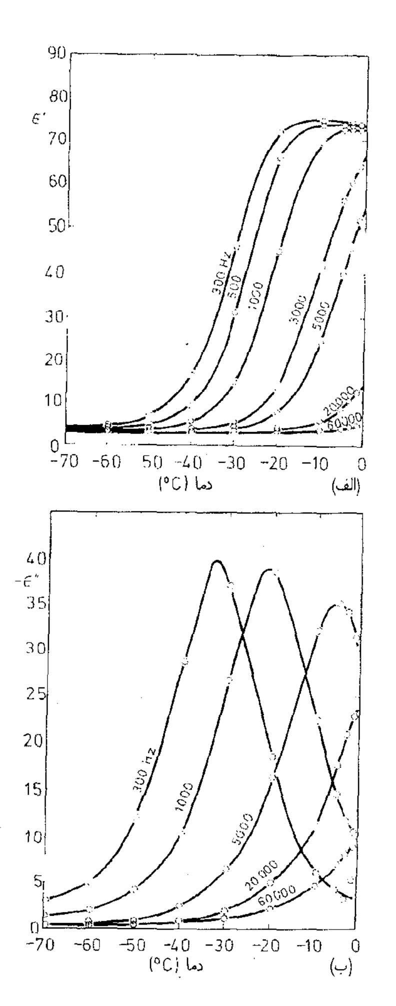
$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\chi(0)}{1 + i\omega\tau} \tag{۲۸-۹}$$

وابستگی بخشهای حقیقی و موهومی ε به بسامد در شکل ۹-۵ نشان داده شده است. به تفاوت کیفی با منحنیهای شکل ۹-۳ توجه کنید؛ از آن جا که هیچ مکان تعادلی برای دو قطبی‌های چرخشی با نیروی بازگرداننده مربوط به آنها وجود ندارد لذا هیچ رفتار تشدید گونه‌ای در شکل ۹-۵ مشاهده نمی‌شود.

شکل ۹-۶ ثابت دی‌الکتریک یخ را به صورت تابعی از دما در بسامدهای مختلف نشان می‌دهد. در هر بسامد کاهش ε' با کاهش دما و بیشینهٔ موجود در ε'' ـ نشانگر ناحیه‌ای است که در آن $\omega\tau \approx 1$؛ لذا از این نتایج می‌توان برای بررسی نحوه وابستگی دمایی زمان واهلش استفاده کرد (مسئله ۹-۴). توجه کنید که بسامدهای مناسب بسامدهای پایین هستند ($10^2 - 10^4\ Hz$)، و این مبین آن است که چرخش مولکولی در جامدات بسیار آهسته است.



شکل ۹-۵: نحوهٔ تغییر بخشهای حقیقی و موهومی ثابت دی‌الکتریک با بسامد مطابق پیش‌بینی معادلهٔ (۹-۲۸)



شکل ۹-۶: بخش‌های حقیقی و موهومی ثابت دی‌الکتریک یخ ε' و ε''، به صورت تابعی از دما در بسامدهای مختلف (برحسب Hz). (با کسب اجازه از مأخذ زیر اقتباس شده است:

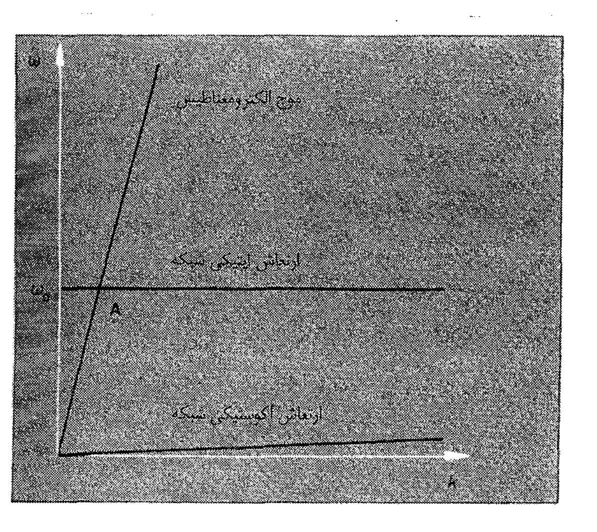
C. P. Smyth and C. S. Hitchcock, J. Am. Chem. Soc. 54, 4631 (1932). Copyright (1932) American Chemistry Society)

۹-۱-۴ ثابت دی‌الکتریک و ارتعاشات شبکه در بلورهای یونی

یک میدان الکتریکی اعمال شده بر بلور یونی باعث جابه‌جایی یونهای مثبت و منفی در جهتهای مخالف یکدیگر می‌شود؛ قطبیدگی حاصل در ثابت دی‌الکتریک سهیم است. از آن جا که مدهای اپتیکی با طول موج بلند ارتعاشات شبکه در بلورهای یونی باعث حرکت یونهای مثبت و منفی در فاز مخالف یکدیگر می‌شوند (بخش ۲-۳-۲)، یک میدان الکتریکی با بسامد مناسب می‌تواند قویاً با این مدها جفت شود. برای بررسی این جفت شدگی و اثر آن بر خواص دی‌الکتریکی بلورهای یونی باید میدان الکتریکی را در معادلات حرکت یونها درج کنیم. خواهیم دید که جابه‌جایی‌های یونی نیز سهمی در میدان الکتریکی دارند، که ما را قادر می‌سازد قسمت بلندبرد نیروی کولنی بین یونها را که در بخش ۲-۳-۲ اغماض کردیم به حساب آوریم؛ وجود این سهم، بسامد مدهای اپتیکی ***طولی*** را قویاً تعدیل می‌کند.

جفت‌شدگی میدان الکتریکی با مدهای اپتیکی **عرضی** شبکه نیز بر انتشار امواج الکترومغناطیسی در بلور یونی تأثیر دارد. روابط پاشندگی برای نور و ارتعاشات شبکه در غیاب جفت‌شدگی در شکل ۹-۷ نشان داده شده‌اند. از آنجاکه سرعت نور با ضریبی از مرتبهٔ 10^5 بیش از سرعت صوت است، تقاطع رابطهٔ پاشندگی نور و رابطهٔ پاشندگی مدهای ارتعاش اپتیکی، که با نقطه A در شکل ۹-۷ نشان داده شده است، در عدد موج بسیار کوچکی رخ می‌دهد (طول موج بلند در مقایسه با فاصلهٔ اتمی). انطباق بسامد و طول موج در این نقطه اصولاً یک شرط تشدید را ارائه می‌کند، که تغییرات قابل توجهی، در منحنی‌های پاشندگی موج الکترومغناطیسی و مدهای اپتیکی **عرضی** به وجود می‌آورد.

ابتدا بلور یونی یک بعدی شکل ۲-۶ را در نظر می‌گیریم. حال معادلات حرکت یونها،



شکل ۹-۷: روابط پاشندگی در نزدیکی $k=0$ برای ارتعاشات اتمی جفت نشده و نور در یک بلور دو اتمی

معادلات (۲-۱۵) و (۲-۱۶)، را تعدیل می‌کنیم تا میدان الکتریکی $\mathbf{E}$ را نیز در برگیرند. چون مدهای *اپتیکی* در حد طول **موج بلند** مورد نظر است، لذا جملاتی که نشانگر برهم‌کنش یک یون با همسایگانش می‌باشند را، با فرض اینکه هر دو نزدیک‌ترین همسایه جابه‌جایی یکسانی داشته باشند؛ تقریب می‌زنیم. اثر اصلی این تقریب وابستگی به k در بسامد مد اپتیکی شکل ۹-۷ است. بنابراین، با در نظر گرفتن u_+ و u_- به عنوان جابه‌جایی موضعی یونهای مثبت و منفی، معادلات (۲-۱۵) و (۲-۱۶) چنین می‌شوند

$$M\ddot{u}_+ = 2K(u_- - u_+) + eE$$

(۹-۲۹)

$$m\ddot{u}_- = 2K(u_+ - u_-) + eE$$

جرم یونهای مثبت و منفی را به ترتیب M و m گرفته‌ایم و آخرین جملات در طرف راست نیروهای وارد بر یونهای با بار $\pm e$ توسط میدان الکتریکی‌اند. اگر حاصل‌ضرب $M/(M+m)$ در دومین معادلهٔ (۹-۲۹) را از حاصل‌ضرب $m/(M+m)$ در اولین معادلهٔ آن کم کنیم معادله‌ای برای جابه‌جایی نسبی $W = u_+ - u_-$ به دست می‌آوریم:

$$\ddot{\mathbf{w}} = -\omega_0^2\,\mathbf{w} + \frac{e}{M^*}\,\mathbf{E} \qquad (۹-۳۰)$$

در اینجا $M^* = \frac{mM}{(M+m)}$ جرم کاهش یافته و $\omega_0 = (2K/M^*)^{1/2}$ بسامد مد اپتیکی در $k = 0$ است که در بخش ۲-۳-۲ با اعمال این فرض که تنها نیروهای کوتاه‌برد حضور دارند به دست آمد. $\mathbf{w}$ و $\mathbf{E}$ را از آن رو به صورت‌برداری نوشته‌ایم که می‌خواهیم معادلهٔ (۹-۳۰) را برای یک بلور سه بعدی به کار بریم تا هم مدهای طولی و هم مدهای عرضی را مطرح کنیم. در تعمیم به حالت سه بعدی فرض می‌کنیم که برهم کنش یک یون با نزدیکترین همسایگانش را بتوان با یک ثابت فنر همسانگرد K توصیف کرد؛ این به آن معناست که مدهای اپتیکی عرضی و طولی در غیاب میدان $\mathbf{E}$، تبهگن هستند.

با قراردادن $\ddot{\mathbf{w}} = 0$، معادلهٔ (۹-۳۰) جابه‌جایی نسبی یونها در یک میدان الکتریکی ایستا را به صورت زیر مشخص می‌کند:

$$\mathbf{w} = \frac{e}{M^*\omega_0^2}\,\mathbf{E} = \frac{e}{2K}\,\mathbf{E} \qquad (۹-۳۱)$$

جابه‌جایی یونها موجب قطبیدگی الکتریکی زیر می‌شود.

$$\mathbf{P} = Ne\mathbf{u}_+ - Ne\mathbf{u}_- + [\varepsilon(\infty) - 1]\varepsilon_0 \mathbf{E} = Ne\mathbf{w} + [\varepsilon(\infty) - 1]\varepsilon_0 \mathbf{E} \qquad (۳۲\text{-}۹)$$

که با درج معادلهٔ (۹-۳۱) در آن چنین می‌شود.

$$\mathbf{P} = \left(\frac{Ne^2}{2K} + [\varepsilon(\infty) - 1]\varepsilon_0 \right) \mathbf{E} \qquad (۳۳\text{-}۹)$$

N چگالی یونهای مثبت در بلور است و عبارت $[\varepsilon(\infty) - 1]\varepsilon_0 \mathbf{E}$ آن گونه که در قسمت ۹-۱-۲ توصیف شده است؛ سهم ناشی از قطبیدگی ابرهای الکترونی هر یون توسط میدان الکتریکی در $\mathbf{P}$ است. نماد $\varepsilon(\infty)$ مشخص می‌کند که این سهم، ثابت دی‌الکتریک $\varepsilon(\omega)$ را در بسامدهایی که در مقایسه با بسامد ارتعاشات شبکه زیاد باشد، تعیین می‌کند. معادلهٔ (۹-۳۳) این امکان را می‌دهد که سهم جابه‌جایی یونی در ثابت دی‌الکتریک ایستا $\varepsilon(0)$ را تعیین کنیم :

$$\varepsilon(0) = \frac{Ne^2}{2K\varepsilon_0} + \varepsilon(\infty) = \frac{Ne^2}{M^* \omega_0^2 \varepsilon_0} + \varepsilon(\infty) \qquad (۳۴\text{-}۹)$$

و بنابراین معادلهٔ (۹-۳۰) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\ddot{\mathbf{w}} = -\omega_0^2 \mathbf{w} + \omega_0^2 \frac{\varepsilon_0 [\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)]}{Ne} \mathbf{E} \qquad (۳۵\text{-}۹)$$

توجه کنید که در این بخش ما از تمایز بین میدان الکتریکی موضعی $\mathbf{E}_L$ در مکانهای یونها و میدان الکتریکی ماکروسکوپی $\mathbf{E}$ صرفنظر می‌کنیم. اگر $\mathbf{E}$، به جای میدان موضعی میدان ماکروسکوپی باشد باز هم معادلاتی به شکل (۹-۲۹) معتبرند، ولی مقادیر مؤثر ثابت فنر K و بار e روی یونها اندکی تعدیل می‌شوند. این تقریب بر نتایج مهم محاسبات، یعنی معادلات (۹-۴۰)، (۹-۴۲)، (۹-۴۳) و (۹-۴۴)، تأثیری ندارد.

میدانهای الکترومغناطیسی درون بلور توسط معادلات ماکسول به هم مربوط می‌شوند:

$$curl\ \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{B}}, \qquad curl \left(\frac{\mathbf{B}}{\mu_0} \right) = \dot{\mathbf{D}} = \varepsilon_0 \dot{\mathbf{E}} + \dot{\mathbf{P}} \qquad (۳۶\text{-}۹)$$

با محاسبهٔ تاو اولین معادله از معادلات (۹-۳۶) و مشتق زمانی دومین معادله می‌توان $\mathbf{B}$ را بین آنها حذف کرد. آن‌گاه، با استفاده از معادلهٔ (۹-۳۲) برای حذف $\mathbf{P}$، داریم

$$curl\ \ curl\ \mathbf{E} = -\frac{\varepsilon(\infty)}{c^2} \ddot{\mathbf{E}} - \frac{Ne}{c^2 \varepsilon_0} \ddot{\mathbf{w}} \qquad (۳۷\text{-}۹)$$

که در آن $c=(\varepsilon_\circ \mu_\circ)^{-1/2}$ سرعت نور در فضای آزاد است. معادله‌های (۹-۳۵) و (۹-۳۷) معادلات جفت‌شده برای میدان الکتریکی $\mathbf{E}$ و جابه‌جایی نسبی یونی $\mathbf{w}$ هستند؛ جفت‌شدگی توسط دومین جمله در طرف راست هر معادله تأمین می‌شود، و در غیاب این جملات معادلات به ترتیب به روابط پاشندگی که شکل ۹-۷ برای مد اپتیکی و موج نوری نشان داده شده است منجر می‌شوند. طبیعت جفت‌شدگی به گونه‌ای است که ارتعاشات عرضی و طولی شبکه به ترتیب تنها با امواج میدان الکتریکی عرضی و طولی جفت می‌شوند.

ابتدا مورد ارتعاشات طولی شبکه و موج میدان الکتریکی طولی متناظر با آنها را در نظر می‌گیریم. چون برای موج میدان الکتریکی طولی $curl\ \mathbf{E}=\circ$، لذا هیچ میدان مغناطیسی‌ای با چنین موجیْ همراه نیست و هیچ موج الکترومغناطیسی‌ای در فضای آزاد به آن وابسته نخواهد بود. از دومین معادلهٔ (۹-۳۶) نتیجه می‌گیریم که برای موج طولی $\mathbf{D}=\varepsilon_\circ\ \mathbf{E}+\mathbf{P}=\circ$ و از این رو معادلهٔ (۹-۳۲) به صورت زیر در می‌آید

$$\mathbf{E}=-\frac{Ne}{\varepsilon_\circ\varepsilon(\infty)}\ \mathbf{w} \qquad (۹\text{-}۳۸)$$

با به کار بردن این عبارت برای حذف $\mathbf{E}$ از معادلهٔ (۹-۳۵) معادلهٔ زیر برای $\mathbf{w}$ حاصل می‌شود:

$$\ddot{\mathbf{w}}=-\omega_\circ^2\left(1+\frac{\varepsilon(\circ)-\varepsilon(\infty)}{\varepsilon(\circ)}\right)\mathbf{w}=-\frac{\varepsilon(\circ)\omega_\circ^2\ \mathbf{w}}{\varepsilon(\infty)} \qquad (۹\text{-}۳۹)$$

این معادلهٔ یک نوسانگر هماهنگ ساده است و برای مدهای اپتیکی طولی با طول موج بلند بسامد زاویه‌ای زیر را پیش‌بینی می‌کند:

$$\omega_L=\left(\frac{\varepsilon(\circ)}{\varepsilon(\infty)}\right)^{1/2}\omega_\circ \qquad (۹\text{-}۴۰)$$

بنابراین اثر بردبلند میدان کولنی آن است که بسامد را با ضریب $[\varepsilon(\circ)/\varepsilon(\infty)]^{1/2}$ تغییر می‌دهد. جملهٔ دوم درون پرانتز در معادلهٔ (۹-۳۹) باعث تعدیل بسامد در مد اپتیکی طولی در اثر میدان الکتریکی یونهای دور دست می‌شود. برای مشاهدهٔ این موضوع، میدان الکتریکی مربوط به این جمله را با استفاده از معادلهٔ (۹-۳۸) مشخص می‌کنیم؛ با محاسبهٔ واگرایی معادلهٔ (۹-۳۸) داریم

$$div.[\varepsilon_\circ\ \varepsilon(\infty)\mathbf{E}]=-div.[Ne\mathbf{w}]$$

که این، قانون گاوس برای میدان الکتریکی ناشی از چگالی بار $-div.[Ne\mathbf{w}]$ است. با توجه به اینکه $-div.\mathbf{P}$ چگالی بار معادل با قطبیدگی $\mathbf{P}$ است، از معادلهٔ (۹-۳۲) نتیجه می‌گیریم که $-div.(Ne\mathbf{w})$ چگالی بار مربوط به جابه‌جاییهای یونی است.

حال امواج **عرضی**، که برای آنها $div.\,\mathbf{E}=0$ است را مورد توجه قرار می‌دهیم، لذا

$$curl\times curl\times\mathbf{E}=\nabla^2\,\mathbf{E}$$

برای یک موج عرضی در جهت x معادلهٔ (۹-۳۷) به صورت زیر در می‌آید

$$\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial x^2}=\frac{1}{c^2}\left(\varepsilon(\infty)\ddot{\mathbf{E}}+\frac{Ne}{\varepsilon_0}\ddot{\mathbf{w}}\right)\tag{۹-۴۱}$$

حال اگر جوابی به صورت زیر را بیازماییم

$$\mathbf{E}=\mathbf{E}_0e^{i(kx-\omega t)},\qquad \mathbf{w}=\mathbf{w}_0e^{i(kx-\omega t)}$$

از معادلهٔ (۹-۴۱) نتیجه می‌شود که

$$k^2c^2\mathbf{E}_0=\omega^2\left[\varepsilon(\infty)\mathbf{E}_0+\frac{Ne}{\varepsilon_0}\mathbf{w}_0\right]$$

و معادلهٔ (۹-۳۵) چنین می‌شود

$$(\omega_0^2-\omega^2)\mathbf{w}_0=\varepsilon_0\left[\varepsilon(0)-\varepsilon(\infty)\right]\omega_0^2\frac{\mathbf{E}_0}{Ne}$$

با حل این معادلات، رابطهٔ پاشندگی زیر را برای امواج عرضی می‌یابیم

$$k^2=\frac{\omega^2}{c^2}\left(\frac{\varepsilon(0)\omega_0^2-\varepsilon(\infty)\omega^2}{\omega_0^2-\omega^2}\right)\tag{۹-۴۲}$$

این رابطه به همراه رابطهٔ پاشندگی مد طولی که قبلاً بحث کرده‌ایم در شکل ۹-۸ رسم شده‌اند. شکل عمومی منحنی پاشندگی با توجه به حدود زیر به سادگی تعیین می‌شود:

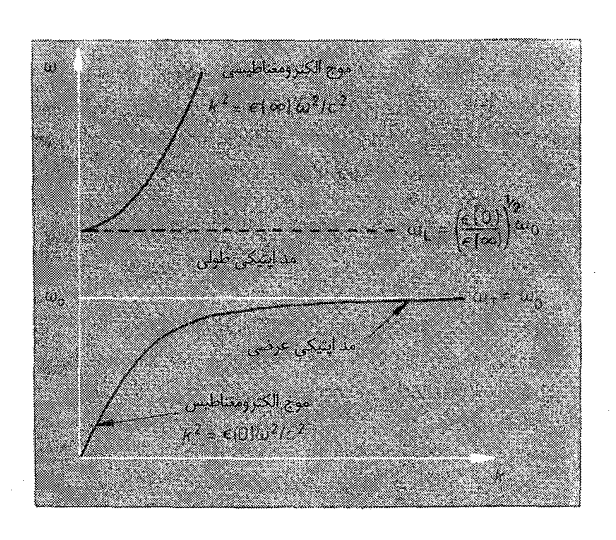
$\omega\ll\omega_0,\qquad k^2=\varepsilon(0)\omega^2/c^2;$

$\omega\gg\omega_0,\qquad k^2=\varepsilon(\infty)\omega^2/c^2;$

$\omega\to\omega_L=[\varepsilon(0)/\varepsilon(\infty)]^{1/2}\omega_0\qquad k^2\to 0;$

$\omega\to\omega_0,\qquad k^2\to\infty$

جفتیدگی مدهای اپتیکی عرضی با میدان الکتریکی در طول موج بلند تغییر بزرگی در روابط پاشندگی ایجاد کرده است؛ در راستای هر یک از دو شاخهٔ عرضی رابطهٔ پاشندگی، حرکتها به آرامی از ارتعاشات صرف شبکه در یک انتها به امواج کاملاً الکترومغناطیسی در انتهای دیگر



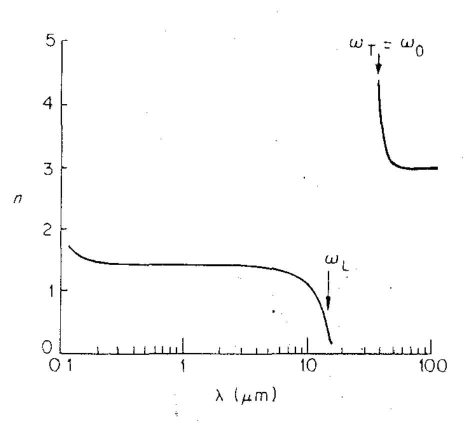
شکل ۹-۸: اثر جفتیدگی ارتعاشات شبکه با یک میدان الکتریکی بر روی روابط پاشندگی در یک بلور یونی برای مد طولی (....)؛ و مد عرضی (—)

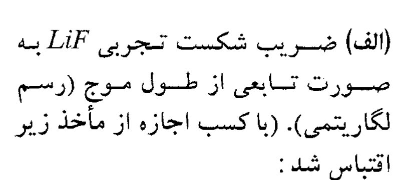
تغییر می‌کنند. کوانتوم وابسته به این حرکت‌ها در ناحیهٔ تغییر نوع حرکت، باید به صورت ترکیبی خطی از یک فوتون و یک فونون اپتیکی عرضی در نظر گرفته شود؛ این موجود را **پلاریتون** می‌نامند. پلاریتونها در آزمایشهای **اثر رامان** دیده شده‌اند. در این آزمایشها تغییر اندازه حرکت و انرژی فوتونها در پراکندگی غیرکشسان توسط بلور اندازه‌گیری می‌شود، و برای به دست آوردن رابطهٔ انرژی - اندازه حرکت مربوط به برانگیختگیهای درون بلور به کار می‌رود.

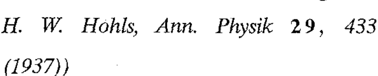
رابطهٔ پاشندگی را می‌توان از طریق اثر آن بر روی ضریب شکست و ثابت دی‌الکتریک نیز مشاهده کرد، مقادیر پیش‌بینی شدهٔ ثابت دی‌الکتریک با استفاده از معادلات (۹-۱۰)، (۹-۱۱) و (۹-۴۲) عبارت است از

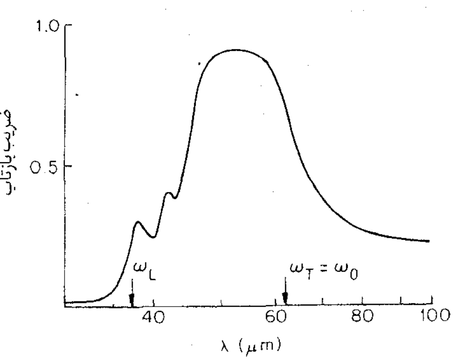
$$\varepsilon(\omega) = n^2(\omega) = \frac{c^2}{(\omega/k)^2} = \left(\frac{\varepsilon(0)\omega_0^2 - \varepsilon(\infty)\omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2}\right) \qquad (۴۳\text{-}۹)$$

توجه کنید که به ازای $\omega \to 0$ و $\omega \to \infty$ معادلهٔ (۹-۴۳) مقادیر مناسب $\varepsilon(0)$ و $\varepsilon(\infty)$ را می‌دهد. همچنین توجه کنید که وقتی $\omega \to \omega_0$ داریم $\varepsilon(\omega) \to \infty$ و وقتی ω به طرف بسامد اپتیکی طولی ω_L در معادلهٔ (۹-۴۰) میل کند $\varepsilon(\omega) \to 0$. شکل ۹-۹ (الف) ضریب شکست اندازه‌گیری شدهٔ LiF را به صورت تابعی از طول موج نشان می‌دهد. واگرایی پیش‌بینی شده برای $n(\omega)$ در ω_0 به وضوح دیده می‌شود؛ از تغییر سریع ضریب شکست در نزدیکی این بسامد، در ساختن منشور برای طیف سنجی فروسرخ استفاده می‌شود. تغییر $n(\omega)$ پاشندگی بی‌هنجار نوعی است که به جذب تشدیدی در بسامد ω_0 وابسته است (با شکل ۹-۳ مقایسه کنید). مدل




(الف) ضریب شکست تجربی LiF به صورت تابعی از طول موج (رسم لگاریتمی). (با کسب اجازه از مأخذ زیر اقتباس شد:


H. W. Hohls, Ann. Physik **29**, *433 (1937)*)



(ب) ضریب بازتاب یک بلور ضخیم *NaCl* (با کسب اجازه از مأخذ زیر اقتباس شد:

A. Mitsuishi et. al. J. Opt. Soc. Am., **52**,*14 (1962)*)

شکل ۹-۹

ما هیچ گونه میرایی ندارد لذا در آن، جذب که یک فرایند کوانتومی است و در آن یک فوتون جذب می‌شود و انرژی آن به ارتعاشات شبکه منتقل می‌شود، پیش‌بینی نمی‌شود. از روی شکل ۹-۹ (الف) واضح است که ثابت دی‌الکتریک برای $\omega \ll \omega_0$ از مقادیر مربوط به $\omega \gg \omega_0$ بیشتر است؛ این تفاوت مطابق نظریه‌ای که به طور خلاصه ارائه کرده‌ایم ناشی از سهم حرکت یونی است.

افزایش فراتر ضریب شکست در طرف چپ شکل ۹-۹ (الف) نشانگر فرارسیدن جذب وابسته به ترازهای انرژی الکترونی یک اتم منزوی است که در بخش ۹-۱-۲ مطرح شد. مقایسهٔ شکلهای ۹-۹ (الف) و ۹-۳ نشانگر تشابه کیفی زیادی است که بین وابستگی بسامدی در سهمهای حرکت نسبی یونی (یک اثر **بین یونی**) و حرکت نسبی الکترونها و هسته در درون هر یون (یک اثر **درون یونی**) در ثابت دی‌الکتریک وجود دارد. البته گستره‌های بسامد بسیار

متفاوتند؛ سهم اولی در ε' معمولاً در بسامدهای ناحیهٔ فروسرخ طیف ناپدید می‌شود حال آن‌که در مورد سهم دومی این امر در فرابنفش یا ناحیهٔ با طول موج بلند پرتو X رخ می‌دهد.

در شکل ۹-۹ (الف) هیچ مقداری برای ضریب شکست در گسترهٔ بسامدی $\omega_\circ < \omega < \omega_L$ نشان داده نشده است، ω_L بسامد مد **اپتیکی طولی** است که توسط معادلهٔ (۹-۴۰) داده می‌شود. در این ناحیه داریم $k^۲ < \circ$، به گونه‌ای که k و در نتیجه $n(\omega)$ موهومی هستند؛ این به آن معناست که هیچ موجی نمی‌تواند منتشر شود. در عوض یک **موج میرایی** وجود دارد که با ورود به بلور به صورت نمایی مستهلک می‌شود و برای تابشی که از بیرون فرود می‌آید **بازتاب کامل خارجی** حاصل می‌شود. شکل ۹-۹ (ب) نشان می‌دهد که اندازه‌گیریهای ضریب بازتاب برای $NaCl$ به طور کیفی متأثر از این پدیده هست، ولی بازتاب هرگز کامل نیست. این پیامد دیگری است از صرفنظر کردن از میرایی؛ دراین گسترهٔ بسامدی، از درون بلوری با ضخامت بیش از چند طول موج هیچ عبوری وجود ندارد، ولی بخشی از انرژی به جای بازتاب، جذب می‌شود. بازتاب از بلورهای یونی راه مفیدی است برای انتخاب نواری از طول موج فروسرخ؛ تابش انتخاب شده را امواج باقیمانده[1] می‌نامند.

اگر عدد موج آن قدر کوچک نباشد که ما را به ناحیهٔ پلاریتون در منحنی پاشندگی شکل ۹-۸ ببرد می‌بینیم که بسامدهای ارتعاشات اپتیکی طولی و عرضی با طول موج بلند با رابطهٔ زیر به یکدیگر مربوط‌اند

$$\frac{\omega_L}{\omega_T} = \frac{\omega_L}{\omega_\circ} = \left(\frac{\varepsilon(\circ)}{\varepsilon(\infty)}\right)^{۱/۲} \qquad (۹\text{-}۴۴)$$

این رابطهٔ **لیدن - ساکس - تلرد** *(LST)* است، که عامتر از چیزی است که محاسبات ما پیشنهاد می‌کند. این رابطه نشان می‌دهد که رابطهٔ بین ω_L و ω_T تنها توسط ثابت دی‌الکتریک ماکروسکوپی تعیین می‌شود.

در بخش ۲-۷-۱ توضیح دادیم که آثار ناهماهنگ موجب می‌شوند که بسامد مدهای ارتعاشی شبکه با دما تغییر کنند و وقتی بسامد یک مد اپتیکی عرضی با طول موج نامتناهی به سمت صفر میل می‌کند، یک گذار فاز جابه‌جاگر می‌تواند رخ دهد. رابطهٔ لیدن - ساکس - تلر پیش‌بینی می‌کند که ناپدید شدن بسامد مدنرم با واگرایی ثابت دی‌الکتریک ایستا، $\varepsilon(\circ) \to \infty$، همراه خواهد بود. اصولاً ناهماهنگی موجب می‌شود که ثابت فنر **مؤثر** k در معادلهٔ (۹-۲۹) در دمای بحرانی صفر شود؛ نتایج $\varepsilon(\circ) \to \infty$ و $\omega_T \to \circ$ مستقیماً از این نکته ناشی می‌شوند.

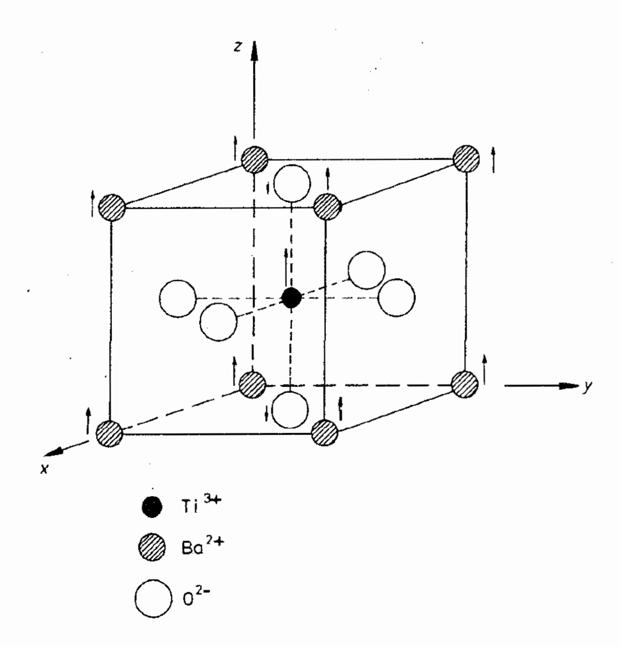
۱- *Reststrahlen*

۹-۲ مواد پیروالکتریک

مواد **پیروالکتریک** در غیاب میدان الکتریکی اعمالی دارای قطبیدگی الکتریکی هستند. هر یاختهٔ یکهٔ بسیط یک گشتاور دو قطبی وابسته به خود دارد. پیشوند **پیرو** از واژه یونانی به معنای آتش می‌آید و از آن رو در اینجا به کار می‌رود که گشتاور دو قطبی ماکروسکوپی تنها هنگامی که ماده گرم شود دیده می‌شود؛ گشتاور دو قطبی معمولاً توسط یونها و الکترونهایی که بر روی سطح نمونه جمع می‌شوند خنثی می‌شود. گرما قسمتی از بارهای سطحی را دور می‌کند و همچنین موجب تغییر در قطبیدگی ججمی می‌شود به گونه‌ای که دیگر پوشانندگی کامل نیست. گشتاور دو قطبی ماکروسکوپی نیز ممکن است به دلیل وجود حوزه‌ها در درون ماده ، که قطبیدگی در هر یک در جهتی متفاوت است، کوچک باشد.

مواد **فروالکتریک** تنها در زیر یک دمای معین پیروالکتریک هستند، که این دما مشخصهٔ ماده است. این مواد از آن رو به این اسم نامیده می‌شوند که مانستهٔ الکتریکی فرومغناطیسها هستند، نه به دلیل آنکه ارتباطی با آهن داشته باشند. گذارهای فرو الکتریکی به راههای مختلفی ممکن است بروز کنند، یک امکان در بلورهای مولکولی حاوی مولکولهای قطبی رخ می‌دهد، این مولکولها قادرند در دماهای بالا بچرخند (بخش ۹-۱-۳ را ببینید)؛ اگر در روند سرد کردن، چرخش متوقف شود گشتاورهای دو قطبی می‌توانند همخط شوند و یک قطبیدگی الکتریکی خودبه‌خودی را به بار آورند. فرو الکتریسیته ممکن است در نتیجهٔ یک تغییر فاز جا به جاگر نیز بروز کند (بخش ۲-۷-۱)؛ فرو الکتریسیتهٔ باریم تیتانات (($BaTi\,O_۳$))، که با این سازوکار حاصل می‌شود، در شکل ۹-۱۰ نمایش داده شده است. $BaTi\,O_۳$ در بالاتر از $۱۲۰^\circ C$ ساختار مکعبی پرووسکیت دارد و پاراالکتریک است؛ در زیر این دما ساختار، به دلیل جابه‌جایی نسبی یونهای مثبت ($Ti^{+۴}\,Ba^{+۲}$) و منفی ($O^{-۲}$) در امتداد [۱۰۰][1] مطابق شکل؛ تغییر شکل می‌دهد و به ساختار چهارگوشی ($a=b\neq c\ ,\ \alpha=\beta=\gamma=۹۰^\circ$) تبدیل می‌شود. با افزایش جابه‌جایی، قطبیدگی الکتریکی خودبه‌خودی وابسته به آن نیز در جهت [۰۰۱] افزایش می‌یابد. در دماهای پایین‌تر، $BaTi\,O_۳$ گذارهای فاز جابه‌جاگر دیگری به ساختارهای حتی با تقارن کمتر را تحمل می‌کند؛ در زیر C °۵- به شکل راستگوش در می‌آید و قطبیدگی در جهت [۰۱۱] مکعب اصلی قرار می‌گیرد و در زیر C °۹۰- به شکل لوزی رخ با قطبیدگی در امتداد جهت [۱۱۱] در می‌آید. در

۱- جابه‌جایی خودبه‌خودی به دلیل تقارن مکعبی می‌تواند با احتمال یکسان در امتداد [۱۰۰] یا [۰۱۰] رخ دهد. در عمل یک تک بلور غالباً به تعدادی حوزه تقسیم می‌شود، هر حوزه یکی از امتدادهای ممکن قطبیدگی را داراست. حضور یک میدان الکتریکی در روند سرد کردن به هنگام گذار می‌تواند یک فرو الکتریک تک حوزه ایجاد کند.



شکل ۹-۱۰ : ساختار مکعبی پرووسکیت برای $BaTiO_3$ در دمای بالاتر از $120°C$. در زیر $120°C$ یک گذار فاز جابه‌جاگر به ساختاری با تقارن چهارگوشی ($a=b\neq c$,$\alpha=\beta=\gamma=90°$) رخ می‌دهد. پیکانها اندازه‌ای نسبی و جهتهای جابه‌جایی یونها در جهت z را مشخص می‌کنند؛ یونهای اکسیژن در $z=c/2$ ثابت در نظر گرفته شده‌اند. این بلور در صفحهٔ xy نیز اندکی فشرده می‌شود. جابه‌جایی یونهای مثبت و منفی در جهتهای مخالف مسئول قطبیدگی خودبه‌خودی است.

بخش بعد مدل ساده‌ای را توصیف می‌کنیم که بسیاری از ویژگیهای مشاهده شده درگذارهای فاز فروالکتریک را تولید می‌کند.

* ۹-۲-۱ مدل لاندائو

در حوالی گذار فاز، قطبیدگی خودبه‌خودی $\mathbf{P}$ غالباً کوچک است و فرض اصلی مدل لاندائو آن است که تحت چنین شرایطی می‌توان چگالی انرژی ماده را به صورت یک سری توانی برحسب $\mathbf{P}$ بسط داد[1].

$$F=F_0+\alpha P^2+\beta P^4+\dots \qquad (۹-۴۵)$$

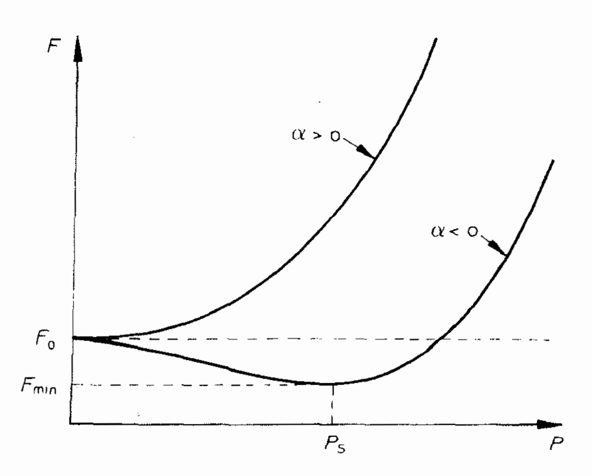
۱- برای بحثی در مورد این بسط، که برای انواع دیگرگذار فاز نیز می‌تواند به کار رود، به فصل ۱۴ کتاب فیزیک آماری اثر لاندائو و لیفشیتز مراجعه کنید.

که F_0 ، α و β ضرایب وابسته به دما هستند. اگر بلور در حالت ناقطبیده ($P = 0$) دارای یک مرکز تقارن باشد، تنها توانهای زوج P در نظر گرفته می‌شوند؛ در نتیجه چگالی انرژی باید با تغییر $P \to -P$ ناوردا باشد. فرض می‌کنیم که جملات با توان‌های بالاتر از P^4 در بسط قابل اغماض باشند (ولی مسئلهٔ ۹-۶ را ببینید). این وضع تنها در صورتی حاصل خواهد شد که $\beta > 0$، در غیر این صورت کمینهٔ F به $P \to \pm \infty$ مربوط خواهد شد، که غیرفیزیکی است.

شکل F به عنوان تابعی از P برای مقادیر مثبت و منفی α در شکل ۹-۱۱ نمایش داده شده است. برای مقادیر مثبت α، F کمینهٔ خود را به ازای $P=0$ اختیار می‌کند، حال آنکه برای مقادیر منفی α، این کمینه در یک مقدار متناهی P رخ می‌دهد. بنابراین، اگر فرض کنیم که مقدار P در حالت تعادل، همان مقداری است که F را کمینه می‌کند، در آن صورت **گذار به حالت فروالکتریک در دمای T_c رخ می‌دهد که در آن دما** α کاهش یافته از صفر می‌گذرد. ما به رفتار در مجاورت این دما علاقمندیم و بنابراین فرض می‌کنیم که کافی باشد که وابستگیهای دمایی α و β با جملات با کوچکترین مرتبه در بسط تیلور آنها حول $T = T_c$ نمایش داده شود.

$$\alpha = a(T - T_c)$$
$$\beta = b \qquad (۹-۴۶)$$

که a و b **ثابت** هستند. جملهٔ مستقل از $T - T_c$ در α ظاهر نشده است زیرا α در $T = T_c$ صفر می‌شود. مطابق بحثی که در بالا ارائه شد b مثبت است و اگر حالت فروالکتریک در دمای زیر T_c پایدار باشد، در آن صورت a نیز مثبت است.



شکل ۹-۱۱: اثر تغییر علامت α بر چگالی انرژی لاندائو

قطبیدگی خودبه خودی P_s با کمینه کردن صریح F حاصل می‌شود. با استفاده از معادلهٔ (۹-۴۵) داریم:

$$\frac{\partial F}{\partial P} = ۲\alpha P + ۴\beta P^۳ = ۰$$

$$P_s = \left(-\frac{\alpha}{۲\beta}\right)^{۱/۲} = \left[\frac{a(T_c - T)}{۲b}\right]^{۱/۲} \quad (۹\text{-}۴۷)$$

که در آن معادلات (۹-۴۶) را به کار برده‌ایم. بنابراین محاسبات ما یک قطبیدگی خودبه‌خودی را پیش‌بینی می‌کند که وقتی T کمتر از T_c شود به صورت $(T_c - T)^{۱/۲}$ افزایش می‌یابد. چون P_c از صفر به طور پیوسته افزایش می‌یابد لذا یک گذار فاز مرتبهٔ دوم پیش‌بینی می‌شود. ولی توجه کنید که گذار فاز فروالکتریکی $BaTiO_۳$ در $۱۲۰°C$ مرتبهٔ اول است (مسئلهٔ ۹-۶ را ببینید).

اگر به معادلهٔ (۹-۴۵) چگالی انرژی برهم کنشی EP- مربوط به قطبیدگی در میدان اعمالی E را بیفزاییم آن گاه مدل لاندائو را می‌توانیم برای پیش‌بینی فشار پذیرفتاری در دمای بالاتر از T_c به کار بریم. در دمای بالاتر از دمای گذار، در میدانهای ضعیف، P کوچک است و از عبارت درجهٔ چهارم در معادلهٔ (۹-۴۵) می‌توان چشم‌پوشی کرد. بنابراین کمینه کردن چگالی انرژی نتیجه زیر را به بار می‌آورد.

$$\frac{\partial F}{\partial P} = ۲\alpha P - E = ۰$$

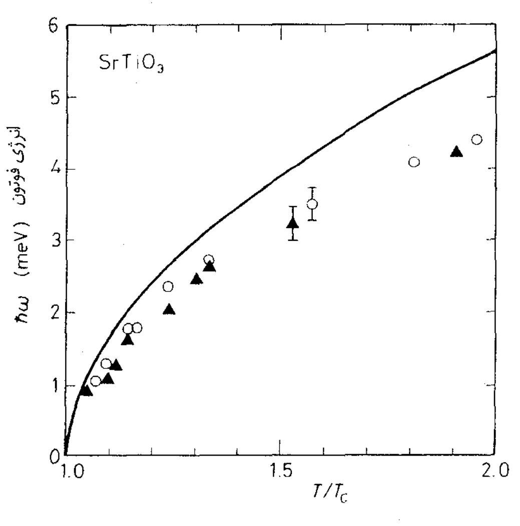
$$P = \frac{E}{۲\alpha} = \frac{E}{۲a(T - T_c)}$$

که در مقایسه با معادلهٔ (۹-۱) پذیرفتاری به صورت زیر مشخص می‌شود

$$\chi = \frac{۱}{۲\alpha\varepsilon_۰ (T - T_c)} \quad (۹\text{-}۴۸)$$

این رابطه معادل الکتریکی قانون کوری - وایس در مغناطیس (معادلهٔ (۸-۹)) است.

از معادلهٔ (۹-۴۸) در می‌یابیم که وقتی $T \to T_c$ پذیرفتاری ایستا و در نتیجه ثابت دی‌الکتریک واگرا می‌شوند. واگرایی ثابت دی‌الکتریک در یک گذار فاز جابه‌جاگر قبلاً در بخش ۹-۱-۴ مورد توجه قرار گرفته است. در آن جا دیدیم که گذار فاز با محو بسامد یک مداپتیکی عرضی در طیف ارتعاشات شبکه همراه بود و این پدیده از طریق معادلهٔ لیدن- ساکس - تلر، معادلهٔ (۹-۴۴)، منجر به واگرایی ثابت دی‌الکتریک می‌شد. مد مربوط به گذار فاز جابه‌جاگر در ساختار پرووسکیت را می‌توان مستقیماً با اندازه‌گیریهای بسامد ارتعاش شبکه توسط پراکندگی ناکشسان نوترونی مشاهده کرد. شکل ۹-۱۲ چنین اندازه‌گیریهایی را برای $SrTiO_۳$



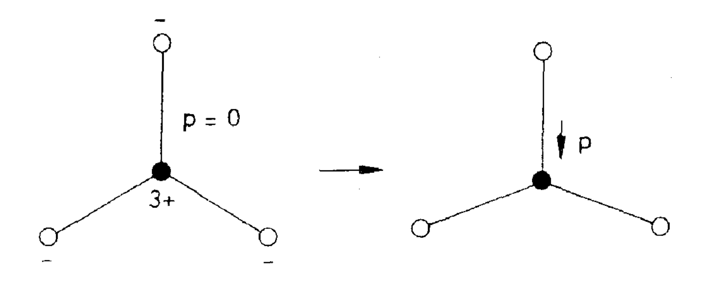
شکل ۹-۱۲ : دایره‌ها و مثلث‌ها نشانگر اندازه‌گیریهای وابستگی دمایی بسامد مد نرم مربوط به گذار فاز جابه‌جاگر $SrTiO_3$ توسط پراکندگی ناکشسان نوترونی هستند. Tc دمایی است که در آن گذار فاز رخ می‌دهد. منحنی توپر نظری است. (با کسب مجوز از مرجع زیر اقتباس شده :
J. Feder and E. Pytte, Phys. Rev. B **1**,*4803 (1970))*

به صورت تابعی از دما نشان می‌دهد.

مدل فروالکتریسیته فوق، نظیر مدل فرومغناطیس وایس، یک نظریهٔ میدان متوسط است. فرض می‌شود که قطبیدگی ثابت و مساوی مقداری است که چگالی انرژی را کمینه می‌سازد. از افت و خیزهای انرژی آزاد حول این مقدار صرفنظر می‌شود. ولی، در نزدیکی گذار فاز مرتبهٔ دوم این افت و خیزها بزرگ هستند و وابستگیهای دمایی در معادلات (۹-۴۷) و (۹-۴۸) را درست نظیر معادلات متناظر در فرومغناطیس تعدیل می‌کنند (بخش ۸-۳-۲) را ببینید).

۹-۳ پیزو الکتریسیته

در مواد **پیزو الکتریک** قطبیدگی هم با اعمال تنش و هم با تغییر میدان الکتریکی تغییر می‌کند؛ برای تنشهای کوچک، قطبیدگی رابطه‌ای خطی با تنش دارد. متقابلاً، در این مواد اعمال میدان الکتریکی موجب کرنش می‌شود. تمام مواد فروالکتریک پیزوالکتریک هستند اما عکس آن صحیح نیست؛ کوارتز مهمترین مثال برای ماده‌ای است که پیزو الکتریک است اما فروالکتریک نیست. شکل ۹-۱۳ روشی را نمایش می‌دهد که در آن یک تنش تک محوری می‌تواند در مولکولی با تقارنی که در غیاب تنش نشانگر گشتاور دو قطبی صفر است گشتاور دو قطبی ایجاد کند. لازم است که مولکول مرکز تقارن نداشته باشد و این نیز محدودیت دیگری است



شکل ۹-۱۳: نمایش روشی که یک مولکول می‌تواند در نتیجهٔ تنش، تک محوری، یک گشتاور دو قطبی به دست آورد.

برای ساختار بلورهایی که می‌توانند خاصیت پیزو الکتریسیته را به نمایش گذارند.

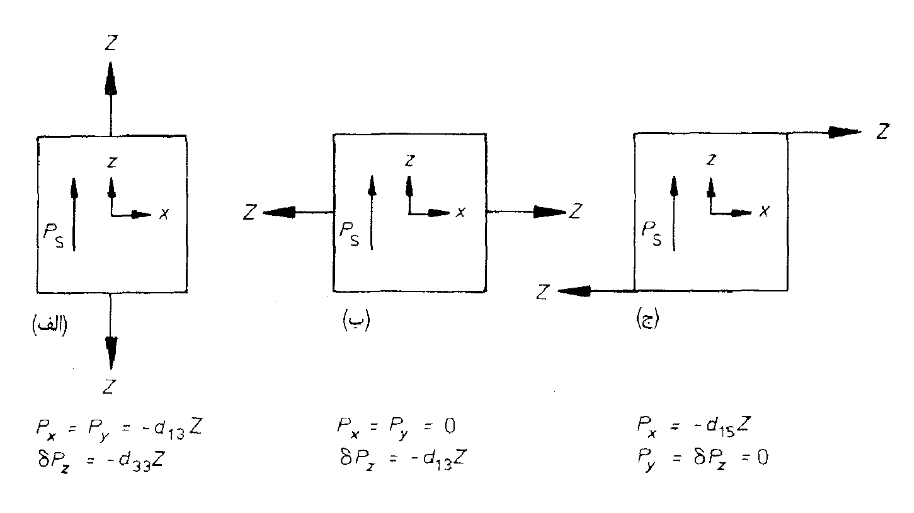
مواد پیزو الکتریک کاربرد وسیعی به عنوان مبدل برای تبدیل انرژی‌های الکتریکی و مکانیکی به یکدیگر دارند. کاربردهای مهم آنها شامل تولید و آشکارسازی امواج فرا صوتی، کنترل الکتریکی جابه‌جاییهای کوچک (برای مثال در دستگاههای اپتیکی و در میکروسکوپ تونلی روبشی) و قطعات موج صوتی سطحی (SAW) می‌شود.

رفتار پیزوالکتریکها با معادلاتی توصیف می‌شوند که کرنش e و قطبیدگی P ی حاصل از اعمال همزمان تنش z و میدان الکتریکی E را مشخص می‌کند. این معادلات عبارتند از:

$$P = -dZ + \varepsilon_0 \chi E$$
$$e = -sZ + dE \qquad (۹-۴۹)$$

که در آن d و χ و s به ترتیب ثابت پیزو الکتریک، پذیرفتاری و تندهی کشسانی ماده است. توجه کنید که قطبیدگی حاصل از یک تنش با همان ضریب d توصیف می‌شود که کرنش حاصل از یک میدان الکتریک توصیف می‌شود. شدت و جهت قطبیدگی القایی توسط یک تنش به نوع و جهت تنش بستگی دارد؛ بنابراین ضریب d ذاتاً تانسوری است. به عنوان مثال، برای آن که خواص پیزوالکتریکی بلور فروالکتریک چهارگوشی $BaTiO_۳$ به طور کامل مشخص شوند، به سه مؤلفهٔ $d_{۱۳}$، $d_{۳۳}$ و $d_{۱۵}$ نیاز است؛ مقادیر آنها در $۲۵°C$ در شکل ۹-۱۴ ذکر شده‌اند که در آن قطبیدگی وابسته به بعضی تنشها با هندسهٔ خاص مشخص شده است. برای توضیحی در مورد نمادگذاری به مرجع زیر مراجعه کنید[1]. مقادیر d برای پیزوالکتریکهای غیر فروالکتریک نظیر کوارتز نوعاً به اندازهٔ یک ضریب ۱۰۰ کوچک‌ترند.

۱- *Crystal Symmetry and Physical Properties by: S. Bhagavantam Academic Press. London (1966)*



شکل ۹-۱۴ : تغییرات در قطبیدگی الکتریکی بلور چهارگوش فروالکتریک $BaTiO_۳$ ناشی از : (الف) تنش تک محوری در امتداد z؛ (ب) تنش تک محوری در امتداد x؛ (ج) تنش برشی در صفحهٔ xz. تنش Z عبارت است از نیروی اعمالی به ازای واحد سطح در هر مورد مقادیر ضرایب در $۲۵°C$ و $۱۰^{-۱۰}\ m\ V^{-۱}$ عبارتند از $d_{۱۳} = -۰/۳۵$، $d_{۳۳} = ۰/۸۶$ و $d_{۱۵} = ۳/۹۲$.

مسایل ۹

۹-۱ نشان دهید که اگر $n(\omega)$ با معادلهٔ (۹-۱۰) و $\varepsilon(\omega)$ با معادلات (۹-۱) و (۹-۲) تعریف شوند، در آن صورت $n(\omega) = [\varepsilon(\omega)]^{۱/۲}$. نشان دهید که انرژی موجی که از درون جامدی می‌گذرد پس از طی فاصلهٔ $c/\{\omega\ [۲(\varepsilon'^{۲} + \varepsilon''^{۲})^{۱/۲} - ۲\varepsilon']^{۱/۲}\}$ با ضریب e کاهش می‌یابد.

۹-۲ نشان دهید که سرعت‌های گروه و فاز v_g و v_p، برای پرتوهای X با طول موج کوتاه در جامد رابطهٔ $v_g v_p = c^{۲}$ را ارضا می‌کنند.

۹-۳ مقدار $\hbar\omega_۰$، که در آن $\omega_۰$ با رابطهٔ (۹-۱۸) داده می‌شود، را با نتیجهٔ نظریهٔ بور در مورد انرژی بستگی یک الکترون به هسته‌ای با بار Ze مقایسه کنید.

۹-۴ با به کاربردن داده‌های شکل ۹-۶، زمان واهلش چرخش مولکولها در یخ را به صورت تابعی از دما برآورد کنید. نشان دهید که وابستگی دمایی با عبارت $\tau = \tau_۰\ exp(T_۰/T)$ سازگار است و مقادیر $\tau_۰$ و $T_۰$ را بیابید. مبنای فیزیکی این نوع وابستگی دمایی چیست؟

۹-۵ در $NaCl$ اندازهٔ هر ضلع یاختهٔ یکه برابر $۵/۶\ Å$، ثابت دی‌الکتریک ایستا ۵/۸۹ و مدول

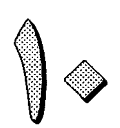
یانگ در جهت [۱۰۰] برابر $5\times 10^{10}\ Nm^{-2}$ است. گسترهٔ بسامدی که برای آن تابش الکترومغناطیسی قویاً توسط بلور $NaCl$ منعکس می‌شود را برآورد کنید و جوابهای خود را با داده‌های تجربی شکل ۹-۹ (ب) مقایسه کنید.

۹-۶ در $BaTiO_3$ گذار فروالکتریکی در دمای $120°C$ مرتبهٔ اول است؛ P_s در دمای T_c به صورت ناپیوسته به یک مقدار متناهی جهش می‌کند. نشان دهید که چنین رفتاری را می‌توان با مدل لاندائو که در آن جملات تا مرتبهٔ ششم برحسب P در چگالی انرژی آزاد به صورت زیر منظور شده‌اند، پیش‌بینی کرد

$$F = F_0 + \alpha p^2 + \beta P^4 + \gamma P^6$$

با رسم نمودارهایی نظیر شکل ۹-۱۱، علامتهای مناسب را برای ضرایب به دست می‌آورید. P_s را در $T = T_c$ برآورد کنید.

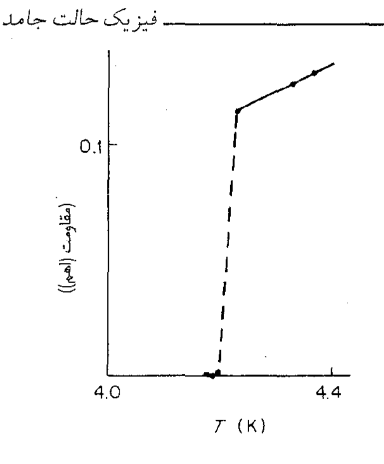
اعتقاد شخصی من آن است که جادهٔ منتهی به یک کشف علمی به ندرت مستقیم است و کشف علمی الزاماً مستلزم مهارت زیاد نیست. در واقع من متقاعد شده‌ام که اغلب تازه واردها در هر زمینه از مزیت بزرگی برخوردارند و آن اینکه غافل‌اند، و تمام دلایل، اینکه چرا یک آزمایش بخصوص را نباید انجام داد، را نمی‌دانند. - ایوان ژیاور (کاشف پدیدهٔ تونل‌زنی بین ابررسانا)، به هنگام دریافت جایزه نوبل در سال ۱۹۷۳ میلادی.



ابررسانایی

۱۰-۱ مقدمه

ابررسانایی در سال ۱۹۱۱ میلادی، توسط اچ. کامرلینگ اونس سه سال پس از اینکه او برای اولین بار هیلیوم را مایع کرد، کشف شد. دسترسی به این مایع او را قادر به بررسی مقاومت الکتریکی در دماهای پایین ساخت. ولی جیوه را برای این منظور برگزید، زیرا در آن زمان خالص سازی جیوه به وسیلهٔ تقطیر به راحتی امکانپذیر بود و این پیش‌بینی مطرح شده بود که مقاومت فلزات بسیار خالص ممکن است در $T=0$ به سوی صفر میل کند. همان گونه که از شکل ۱۰-۱ پیداست، رفتار مشاهده شده به مراتب مهیج‌تر از این بود؛ گذاری ناگهانی به حالتی با مقاومت ظاهراً صفر در دمایی حدود $۴/۲K$ روی داد. اونس این حالت جدید را به عنوان حالت ابررسانایی توصیف کرد و بلافاصله تثبیت شد که هیچ ارتباط اساسی بین این پدیده و خلوص بالای مواد ندارد؛ افزودن مقدار قابل توجهی از ناخالصی به ماده اغلب تأثیر اندکی روی گذار ابررسانایی دارد، هر چند با این کار، مقاومت حالت بهنجار (عادی) به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد (بخش ۳-۳-۲).



شکل ۱۰-۱: گذار ابررسانایی جیوه. [اقتباس از
H. Kamerligh Onnes, Leiden Commun. **124c.** *(1911)*]

متعاقب آن نشان داده شد که فلزات و آلیاژهای بسیاری ابررسانا می‌شوند[1]. گذار ابررسانایی می‌تواند بسیار تیز، با پهنای کمتر از $۱۰^{-۳} K$، در تک بلورهایی از فلزی، از قبیل قلع کاملاً باز پخت شده، باشد. عنصر با بالاترین دمای گذار، $T_c = ۹/۲\ K$، نیوبیوم (Nb) است. جستجو برای یافتن موادی با دماهای گذار بالاتر منجر به مطالعهٔ آلیاژها و ترکیبات شد. در سال ۱۹۷۲ میلادی کشف شد که دمای گذار $Nb_۳ Ge$ برابر $۲۳K$ است. تا چهارده سال بعد از آن، این T_c به عنوان بالاترین دمای گذار ثبت شد و برخی از توجیه‌های نظری، پژوهشگران زیادی را به این باور غلط رساند که دستیابی به دماهای گذار بسیار بالاتر امکانپذیر نیست تا اینکه در سال ۱۹۸۶ میلادی، وقتی بدنورزو و مولر کشف کردند که برای $La_{۲-x} Ba_x CuO_۴$، به ازای $x \approx ۰/۱۵$، T_c حدود $۳۵K$ است، گام بزرگی برداشته شد. به دنبال این کشف، کنکاش پیگیری برای یافتن سایر مواد ابررسانا آغاز شد. در سال ۱۹۸۷ نشان داده شد که T_c ی ابررسانای $YBa_۲Cu_۳O_{۷-\delta}$ (با $\delta \approx ۰/۱$) برابر $۹۲K$ است و در سال ۱۹۸۸ میلادی مشخص شد که دمای گذار $Bi_۲ Sr_{۳-x} Ca_x Cu_۲ O_{۸-\delta}$ (با $x \leq ۱$) به $۱۱۰\ K$ افزایش یافت. در زمان تألیف این کتاب بالاترین T_c ی شناخته شده $۱۲۵\ K$ بوده است که به $Tl_۲Ba_۲Ca_۲Cu_۳O_{۱۰}$، که در همان سال ۱۹۸۸ میلادی کشف شده است، مربوط می‌شود. در بخش ۱۰-۶ بیشتر پیرامون این ابررساناهای با دمای گذار بالا (**ابررساناهای گرم**) بحث خواهیم کرد.

هیچکس موفق نشده است مقاومت متناهی‌ای در مقابل جریانهای اندک در حالت ابررسانایی اندازه بگیرد. حساسترین روش آشکارسازی یک مقاومت کوچک آن است که افت جریان را در یک حلقهٔ بستهٔ ابررسانا اندازه بگیریم. اگر مقاومت حلقه R و خودالقایی آن L باشد، در آن صورت جریان باید با ثابت زمانی $\tau = L/R$ افت کند. عدم توفیق در مشاهدهٔ **افت جریان**

۱- در میان عناصر فلزی متداول که در دماهای دسترس پذیر کنونی ابررسانا نمی‌شوند، از مس، طلا، فلزات قلیایی و فلزاتی که نظم مغناطیسی دارند، از قبیل آهن، نیکل و کبالت، می‌توان نام برد.

ماندگار باعث شده است که کران بالایی در حدود Ωm $^{-۲۶}$۱۰ برای مقاومت ابررساناها در مقایسهٔ با مقداری از مرتبهٔ Ωm $^{-۸}$۱۰ برای مس در دمای اتاق محاسبه شود (مسئله ۱۰-۱).

۱۰-۲ خواص مغناطیسی ابررساناها

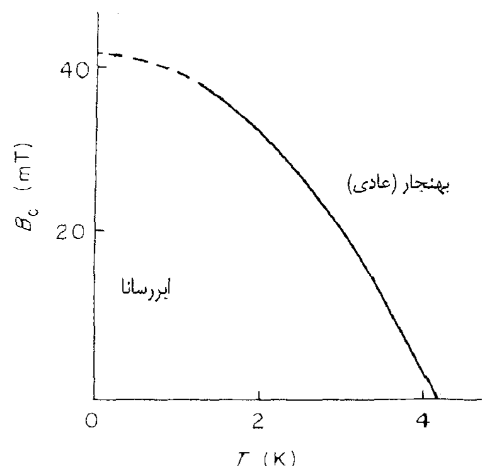
۱۰-۲-۱ ابررساناهای نوع اول

ابررساناها، براساس رفتارشان در حضور میدان مغناطیسی، به دو دسته تقسیم می‌شوند. در این بخش رفتار ساده‌تر مربوط به **ابررساناهای نوع یک** و در بخش ۱۰-۲-۳ **رفتار ابررساناهای نوع دو** را توصیف می‌کنیم. همهٔ نمونه‌های خالص عناصر ابررسانا، به جز Nb، رفتار ابررسانای نوع یک را از خورد بروز می‌دهند و خاصیت ابررسانایی با میدان مغناطیس اعمال شدهٔ نه چندان بزرگ، B_c، که به **میدان بحرانی** موسوم است، تخریب می‌شود. در شکل ۱۰-۲ میدان B_c به صورت تابعی از دما برای جیوه نشان داده شده است. وابستگی دمایی B_c، با تقریبی خوب، به قرار زیر است :

$$B_c(T)=B_c(\circ)\left[1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^{2}\right] \qquad (۱۰-۱)$$

از وجود یک میدان بحرانی نتیجه می‌شود که برای شارش جریانی در سیم نیز یک مقدار بحرانی وجود خواهد داشت و آن جریانی است که میدان ناشی از آن برابر B_c شود؛ این امر به **فرضیهٔ سیلسبی** موسوم است.

در سال ۱۹۳۳، مایسنر و اوشنفلد تغییرات فضایی میدان مغناطیسی را در همسایگی یک ابررسانا مطالعه و کشف کردند که توزیع میدان با صفر بودن میدان درون ابررسانا سازگار است. این طرد شار مغناطیسی از ابررسانا به **اثر مایسنر** شهرت دارد و از جریانهای الکتریکی‌ای موسوم



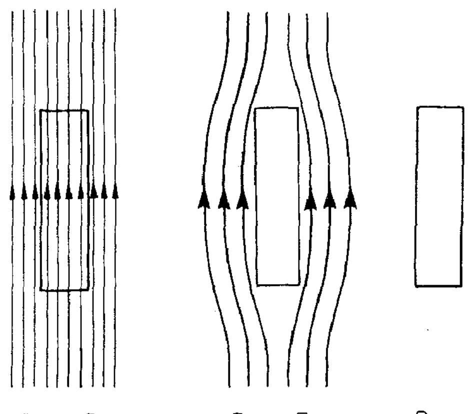
شکل ۱۰-۲: منحنی میدان بحرانی جیوه.

به جریانهای **استتار** ناشی می‌شود، که در سطح ابررسانا شارش می‌کنند، به گونه‌ای که میدانی مساوی در جهت خلاف میدان اعمالی تولید می‌کنند. طرد شار میدان، به هنگام کاهش میدان به مقداری کمتر از B_C و در دمایی ثابت در شکل ۱۰-۳، برای نمونه‌ای به شکل استوانهٔ طویل، نشان داد شده است؛ اگر نمونه در حضور میدان اعمالی پا یا آن قدر سرد شود تا به حالت ابررسانایی برود نیز طرد میدان روی می‌دهد. برای بسیاری از منظورها می‌توانیم با به حساب آوردن اثر مایسنر، ابررسانا را به منزلهٔ یک مادهٔ مغناطیسی در نظر بگیریم که در آن به جای جریانهای استتاری یک مغناطش هم ارز آن جریانها وجود داشته باشد؛ از آنجا که لازم داریم $\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) = 0$، باید داشته باشیم

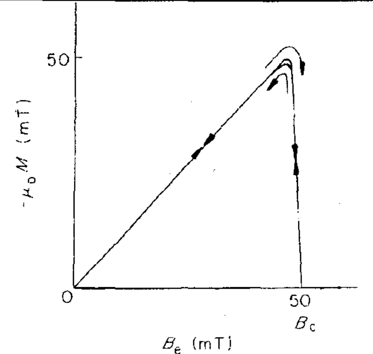
$$\mathbf{M} = -\mathbf{H} \qquad (۱۰\text{-}۲)$$

مقایسهٔ معادلهٔ (۱۰-۲) با معادلهٔ (۷-۱) نشان می‌دهد که یک ابررسانای نوع یک چنان رفتاری دارد که گویی پذیرفتاری مغناطیسی آن $\chi = -1$ است و در نتیجه اغلب از آن به عنوان یک **دیامغناطیس کامل** یاد می‌شود. شکل ۱۰-۴ نمایش می‌دهد که چگونه یک استوانهٔ طویل از سرب کاملاً باز پخت شده، مطابق آنچه که از معادلهٔ (۱۰-۲) پیش‌بینی می‌شود، رفتار می‌کند.

نمونه‌های باز پخت نشده اغلب اثر ناکامل مایسنر را از خود نشان می‌دهند؛ شار مغناطیسی درون ماده در نواحی شبه پایدار، که وقتی میدان به مقداری کمتر از B_C کاهش می‌یابد به حالت بهنجار باقی می‌مانند، به دام می‌افتد. به دام اندازی شار تا حدودی، ۲۲ سال تأخیر بین اولین مشاهدهٔ ابررسانایی و کشف اثر مایسنر را توجیه می‌کند. این نکته روشن نشده بود که شار به دام افتاده تنها جلوه‌ای از رفتار غیر تعادلی است؛ در عوض، استدلال زیر آن را به منزلهٔ نتیجه‌ای مسلم از



شکل ۱۰-۳: طرد شار از استوانهٔ طویل ابررسانا وقتی میدان به مقداری کمتر از B_C کاهش می‌یابد. در حالت تعادل، شار به دام نمی‌افتد.

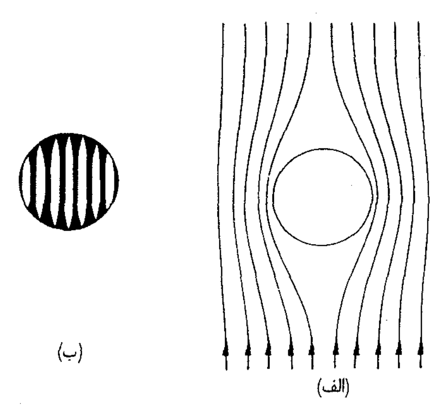


شکل ۱۰-۴: منحنی تقریباً برگشت‌پذیر مغناطش میله‌ای از سرب خالص ابررسانای کاملاً باز پخت شده. این منحنی با کسب اجازه، از مرجع زیر اقتباس شده است:

J. P. Livingston, Phys. Rev., 129, 1943 (1963).

رسانندگی نامتناهی حالت ابررسانایی تلقی می‌کند. رسانندگی نامتناهی حکایت از صفر بودن میدان الکتریکی درون یک ابررسانا می‌کند و بنابراین، با استفاده از قانون فاراده، $Curl\,\mathbf{E} = \dot{\mathbf{B}}$، مبین وجود یک میدان مغناطیسی مستقل از زمان است. این امر به اشتباه این گونه تفسیر شد که هر میدان مغناطیسی‌ای درون نمونه، در اثر گذار به حالت ابررسانایی به دام خواهد افتاد. کشف اثر مایسنر نشان داد که حالت شار صفر حالت تعادلی واقعی یک نمونهٔ استوانه‌ای طویل، در حضور تمامی میدانهای کمتر از B_c است.

در مورد سایر شکلهای نمونه، طرد کامل شار، حتی در نمونه‌های کاملاً باز پخت شده، در حضور تمامی میدانهای کمتر از B_c روی نمی‌دهد. برای توضیح این امر، نمونهٔ کروی شکلی را، مطابق شکل ۱۰-۵، در نظر می‌گیریم. به این دلیل‌که شار از درون کره به بیرون رانده می‌شود،



شکل ۱۰-۵: (الف) کرهٔ ابررسانا در حالت مایسنر، میدان در استوا به اندازهٔ ٪۵۰ بزرگتر از میدان اعمالی است. (ب) حالت میانی کره ابررسانای نوع یک، مناسب میدانهای اعمال شدهٔ بین $\frac{2}{3}B_c$ و B_c. با افزایش در این گستره، نواحی بهنجار سایه زده به قیمت کاهش نواحی ابررسانای سایه نزده، رشد می‌کنند. برای سادگی، خطوط میدان نشان داده نشده‌اند.

میدان در استوای کره بر میدان اعمال شده فزونی خواهد داشت. از این رو، وقتی میدان اعمالی به مقدار $\frac{2}{3}B_c$ می‌رسد، میدان در استوا برابر B_c می‌شود و کره دیگر نمی‌تواند به حالت مایسنر باقی بماند. این کره نمی‌تواند به حالت بهنجار گذار کند، زیرا این عمل میدان را در همه جا به $\frac{2}{3}B_c$ کاهش می‌دهد، که در آن مقدار میدان، حالت بهنجار پایدار نیست. به ازای میدانهای بین $\frac{2}{3}B_c$ و B_c کره **در حالت میانی** است، حالتی که در آن، کره حاوی نواحی **ماکروسکوپی** یک در میان بهنجار و ابررسانایی است و در شکل ۱۰-۵ (ب) نمایش داده شده است؛ میدان در نواحی بهنجار برابر B_c و در نواحی ابررسانا صفر است. حالت میانی ابررسانای نوع یک را نباید با حالت آمیختهٔ ابررسانای نوع دو اشتباه کرد (بخشهای ۱۰-۲-۳ و ۱۰-۵-۳).

وجود میدان بحرانی B_c پیامدی از اثر مایسنر است. انرژی ذخیره شده در میدان ($B^2/2\mu_0$ به ازای واحد حجم) برای حالت مایسنر، بزرگتر است از انرژی حالت بهنجار، که در آن میدان به طور یکنواخت به درون ماده نفوذ می‌کنند[1] (معمولاً می‌توان از مغناطیس ضعیف حالت بهنجار صرفنظر کرد). سرانجام، با افزایش میدان مغناطیسی، انرژی افزایش یافتهٔ میدان مغناطیسی با اختلاف انرژی بین حالتهای بهنجار و ابررسانا برابری می‌کند و برای ماده مطلوبتر خواهد بود که به حالت بهنجار گذار کند. برای بحث کمّی این استدلال باید قدری به ترمودینامیک ساده بپردازیم.

۱۰-۲-۲ ترمودینامیک گذار ابررسانایی

میدان B_c، که به ازای آن حالتهای بهنجار (N) و ابررسانا (S) در تعادلند، از برابری انرژیهای آزاد گیبس آنها مشخص می‌شود. عبارت کار مغناطیسی را برابر $-\mathbf{M}\cdot d\mathbf{B}_e$ می‌گیریم. که در آن $\mathbf{B}_e$ میدان اعمالی است و انرژی آزاد گیبس به ازای واحد حجم عبارت است از[2]

$$G = U - TS$$

که در آن U و S انرژی داخلی و آنتروپی به ازای واحد حجم‌اند. حال کمیت زیر را محاسبه

۱- انرژی مغناطیسی **درون** ماده، برای حالت مایسنر کوچکتر است، زیرا برای آن $B=0$ و انرژی افزایش یافتهٔ خارج ماده از مقدار لازم برای جبران هم بیشتر است.

۲- برای بحث پیرامون کار مغناطیسی، کتاب نوشتهٔ مندل[2] را ملاحظه کنید. انتخاب عبارت کار در ابررسانایی به صورت $\mathbf{B}_e\cdot d\mathbf{M}$ متداولتر است، البته در ابررسانایی نه در مغناطیس. این عبارت مناسب انرژی داخلی $U' = U + \mathbf{M}.\mathbf{B}_e$ است که شامل انرژی برهم کنش نمونه با منابع میدان خارجی $\mathbf{M}.\mathbf{B}_e$، می‌شود. در این رهگذر، G به صورت $G = U' - TS - \mathbf{M}.\mathbf{B}_e$ نوشته می‌شود. اینکه جملهٔ PV را در G منظور نمی‌کنیم، به معنای چشم‌پوشی از اثر تغییرات فشار نمونه در حین گذار ابررسانایی است.

می‌کنیم

$$dG = dU - TdS - SdT = TdS - \mathbf{M}.d\mathbf{B}_e - TdS - SdT$$
$$= -\mathbf{M}.d\mathbf{B}_e - SdT \qquad (۳-۱۰)$$

بنابراین G آن تابع ترمودینامیکی است که در تعادل گرمایی، در دما و میدان اعمالی ثابت، کمینه می‌شود.

استوانه‌ای طویل از یک ابررسانا را موازی با میدان اعمالی در نظر می‌گیریم. از معادلهٔ (۱۰-۳)، در دمای ثابت، می‌توان انتگرال گرفت و به اثر میدان اعمال شده روی انرژی آزاد یک ابررسانا دست یافت.

$$G_s(B_e, T) = G_s(0, T) - \int_0^{B_e} \mathbf{M}.d\mathbf{B}_e \qquad (۴-۱۰)$$

برای استوانه‌ای طویل در پیوست (ب) نشان داده‌ایم که $\mathbf{B}_e = \mu_0 \mathbf{H}$، که در آن $\mathbf{H}$ میدان درون ابررساناست. با درج $\mathbf{M} = -\mathbf{H}$ [معادلهٔ (۱۰-۲)]، برای ابررسانای در حالت مایسنر، چنین خواهیم یافت.

$$G_s(B_e, T) = G_s(0, T) + \int_0^{B_e} \frac{B_e}{\mu_0}\, dB_e = G_s(0, T) + \frac{B_e^2}{2\mu_0} \qquad (۵-۱۰)$$

که در آن آخرین جمله، همان گونه که در انتهای بخش پیشین بحث شد، نمایشگر انرژی مغناطیسی اضافی مربوط به طرد میدان مغناطیسی است. در صورتی که از مغناطیس ضعیف حالت بهنجار چشم بپوشیم، در آن صورت انرژی آزاد گیبس G_N این حالت مستقل از میدان است

$$G_N(B_e, T) = G_N(0, T)$$

با برابر گرفتن انرژیهای آزاد گیبس در میدان بحرانی خواهیم داشت

$$G_N(0, T) - G_s(0, T) = \frac{B_c^2}{2\mu_0} \qquad (۶-۱۰)$$

و در نتیجه میدان بحرانی به طور مستقیم به اختلاف انرژیهای آزاد بین حالتهای بهنجار ابررسانایی در میدان صفر، مربوط می‌شود، به همین دلیل B_c اغلب به میدان بحرانی ترمودینامیکی موسوم است. مقدار مثبت $G_N - G_S$ توضیح می‌دهد که چرا، در میدان صفر، حالت ابررسانایی پایدارتر از حالت بهنجار است؛ این کمیت **انرژی چگالش** حالت ابررسانایی است.

به طور تجربی یافت شده است که تقریباً $B_c \propto T_c$ و ثابت تناسب از مرتبهٔ $0/01 TK^{-1}$ است؛ از این رو، به کمک معادلهٔ (۱۰-۶)، انرژی چگالش از مرتبهٔ $40\, T_c^2\, Jm^{-3}$ خواهد بود. این

اختلاف انرژی متناظر است با کسر $k_B T_c / \varepsilon_F$ از الکترونهای رسانش، که انرژی آنها به میزان $k_B T_c$ در اثر گذار به حالت ابررسانایی کاهش یافته است و بنابراین با ضریب $(k_B T_c / \varepsilon_F)^2 \sim 10^{-7}$ کوچکتر از انرژی جنبشی کل الکترونهاست.

از معادلهٔ (۱۰-۶) می‌توان به دو نتیجهٔ مهم دقیق در مورد ابررساناهای نوع یک رسید. با استفاده از $S = -(\partial G/\partial T)$ [از معادلهٔ (۱۰-۳)] در می‌یابیم که اختلاف در چگالی بین این حالت، در میدان صفر، عبارت است از

$$\Delta S = S_S - S_N = \frac{1}{2\mu_0} \frac{dB_c^2}{dT} = \frac{B_c}{\mu_0} \frac{dB_c}{dT} \qquad (۱۰\text{-}۷)$$

با به کارگیری $C = T\, \partial S / \partial T$، اختلاف در ظرفیت گرمایی به ازای واحد حجم، در میدان صفر، چنین است

$$\Delta C = C_S - C_N = \frac{T}{2\mu_0} \frac{d^2 B_c^2}{dT^2} = \frac{T}{\mu_0} \left[B_c \frac{d^2 B_c}{dT} + \left(\frac{dB_c}{dT} \right)^2 \right] \qquad (۱۰\text{-}۸)$$

استفاده از معادلات (۱۰-۷) و (۱۰-۸) توأم با منحنی میدان بحرانی به صورتی که در شکل ۱۰-۲ نشان داده شده است ما را قادر می‌سازد تا به چند نتیجه‌گیری کیفی مهم دست یابیم.

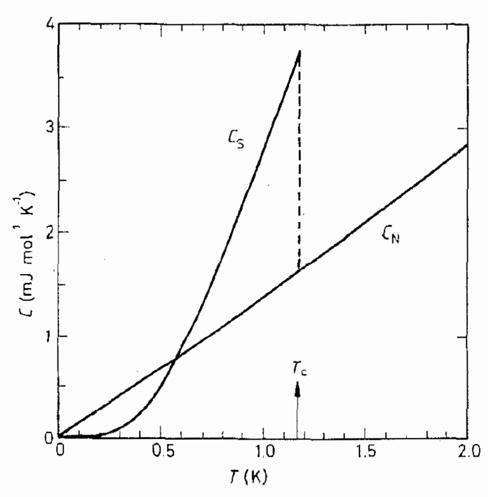
(۱) در T_c اختلاف آنتروپی ΔS صفر می‌شود، زیرا در آن دما $B_c = 0$، ولی اختلاف ظرفیت گرمایی ΔC متناهی است، زیرا $dB_c/dT > 0$؛ ناپیوستگی در ظرفیت گرمایی در T_c در شکل ۱۰-۶ آشکارا دیده می‌شود. این شکل ظرفیت گرمایی اندازه‌گیری شده برای آلومینیوم را نشان می‌دهد. بنابراین گذار ابررسانایی در میدان اعمالی صفر یک گذار مرتبهٔ دوم است.

(۲) ΔS و ΔC، مطابق قانون سوم ترمودینامیک، در $T = 0$ صفر می‌شوند.

(۳) برای $0 < T < T_C$، dB_c/dT منفی و در نتیجه $\Delta S < 0$ است؛ لذا حالت ابررسانایی منظم‌تر از حالت بهنجار است؛ ماهیت این نظم را در بخش ۱۰-۴ مورد بحث قرار می‌دهیم.

(۴) به دلیل اینکه ΔS برای $0 < T < T_c$، متناهی است، گرمای نهانی در گذار ابررسانایی، در میدانی متناهی وجود دارد که با $T\Delta S$ بیان می‌شود؛ معادلهٔ (۱۰-۷) دقیقاً اختلاف آنتروپی در میدان صفر را به دست می‌دهد ولی ΔS مستقل از میدان است. S_N مستقل از میدان است، زیرا مغناطیس حالت بهنجار بسیار ضعیف است و S_S مستقل از میدان است، چون اثر مایسنر به این معناست که میدان درون ابررسانا، تا میدانی برابر B_c، صفر باقی می‌ماند.

نتیجه‌گیریهای (۱)، (۲) و (۳) برای ابررسانای نوع دو معتبر باقی می‌مانند ولی آنها را به روش دیگر باید اثبات کرد. چراکه ابررسانای نوع دو گذاری تیز، از حالت مایسنر به حالت بهنجار در میدانی برابر B_c، از خود نشان نمی‌دهند.



شکل ۱۰-۶ : ظرفیت گرمایی آلومینیوم بهنجار و ابررسانا. اندازه‌گیریهای حالت بهنجار با اعمال میدانی بزرگتر از B_C انجام شده‌اند. دمای دبی بالای آلومینیوم به این معناست که سهم شبکه در ظرفیت گرمایی، در این گسترهٔ دما، اندک و سهم الکترونی غالب است. به ناپیوستگی در ظرفیت گرمایی در T_c و کاهش نهایی C_S در دماهای پایین توجه کنید. اقتباس از

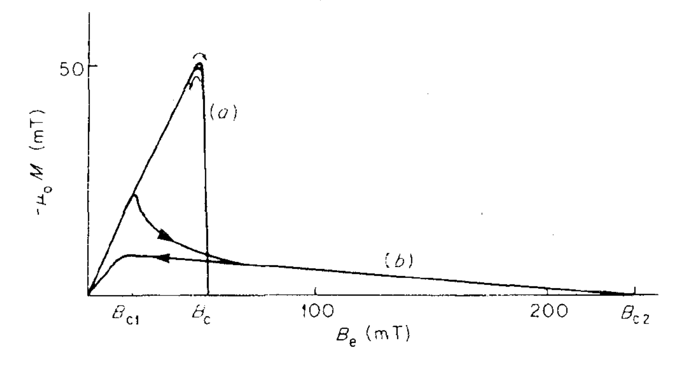
N.E. Phillips, Phys. Rev. **114**, *676 (1959).*

۱۰-۲-۳ ابررساناهای نوع دو

اگرچه Nb تنها عنصری است که در حالت خالص خود ابررسانای نوع دو است، ولی سایر عناصر نیز عموماً، وقتی که مسافت آزاد میانگین الکترونها در آنها به وسیلهٔ آلیاژسازی به قدر کافی کاهش داده می‌شود، ابررسانای نوع دو می‌شوند. شکل ۱۰-۷ منحنیهای مغناطش استوانه‌های نازک Pb ی خالص و آلیاژ Pb-In را مقایسه می‌کند؛ آلیاژ با افزایش میدان، فقط تا میدان B_{c_1}، اثر کامل مایسنر را از خود نشان می‌دهد. میدان B_{c_1} کمتر از میدان بحرانی ترمودینامیکی مربوط به Pb خالص است. برای میدان خارجی بزرگتر از B_{c_1} شار مغناطیسی به طور جزئی به درون آلیاژ نفوذ می‌کند، هر چند آلیاژ، مشخصهٔ حالت ابررسانایی خود، یعنی حمایت از شارش جریان بدون اتلاف، را حفظ می‌کند[۱]. گذار به حالت بهنجار و نفوذ کامل شار در میدان به طور قابل ملاحظه بالاتر B_{c_2} روی می‌دهد. آلیاژ، در میدانهای بین **میدانهای بحرانی پایینی و بالایی** خود، B_{c_1} و B_{c_2}، **در حالت آمیخته** است که ماهیت آن در بخش ۱۰-۵-۳ توضیح داده خواهد شد.

براساس معادلهٔ (۱۰-۴)، افزایش انرژی آزاد گیبس مربوط به طردشار مغناطیسی به وسیلهٔ یک ابررسانا با مساحت، $\int -\mathbf{M} \cdot d\mathbf{B}_e$، زیر منحنی مغناطش برابر است. این معادله مطلقاً فقط در حالتهای تعادل به کار بردنی است؛ این حالتها با منحنیهای برگشت پذیر مغناطش مشخص می‌شوند. ولی می‌توان آن را به تقریب در مورد منحنی تقریباً برگشت‌پذیر مربوط به آلیاژ Pb-In در شکل ۱۰-۷ نیز به کار برد. مساحت زیر این منحنی تقریباً برابر مساحت زیر منحنی

۱- جریان بحرانی I_c به وسیلهٔ فرضیهٔ سلسبی به میدان بحرانی مربوط نمی‌شود، ولی به حالت متالوژی بستگی دارد؛ هر چه ماده ناهمگن‌تر باشد، I_c بیشتر خواهد بود (برای توضیح بخش ۱۰-۵-۳ را ببینید).



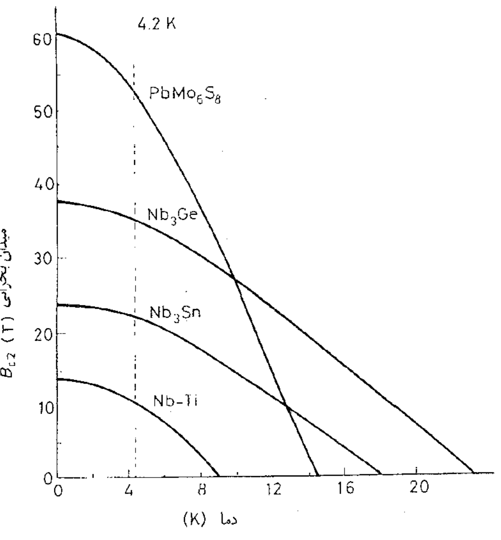
شکل ۱۰-۷: منحنیهای تقریباً برگشت‌پذیر مغناطش برای میله‌های طویل کاملاً بازپخت شدهٔ: (الف) سرب خالص (مانند شکل ۱۰-۴)؛ (ب) سرب نوع دو حاصل از آلیاژ سازی با ۸/۲۳٪ ایندیوم. این منحنی، با مجوز، از مرجع زیر اقتباس شده است:
J.P. Livingston, Phys. Rev. **129**, *1943 (1963).*

مغناطش Pb خالص است؛ در می‌یابیم که آلیاژسازی تغییر اساسی‌ای در انرژی چگالش ایجاد نمی‌کند. نفوذ جزئی میدان در حالت آمیخته امکان تداوم ابررسانایی تا میدانهای به طور قابل ملاحظهٔ بالاتری را در آلیاژ فراهم می‌سازد. با افزایش غلظت ایندیوم B_{c_1} کم و B_{c_2} زیاد می‌شود.

در ابررساناهای نوع دوم فرین، B_{c_1} آن قدر کوچک است و نفوذ میدان در حالت آمیخته تقریباً آن قدر کامل است که قبل از اینکه مساحت زیر منحنی مغناطش با انرژی چگالش برابری کند، مقادیر بسیار زیادی برای B_{c_2} حاصل می‌شود. برای مقادیر بزرگ B_{c_2} باید رهیافت ترمودینامیکی خود را تعمیم دهیم تا کاهش در انرژی آزاد گیبس مربوط به پارامغناطیس ضعیف حالت بهنجار را نیز منظور کنیم. این کاهش، کران بالایی بنیادی‌ای بر B_{c_2} تحمیل می‌کند، که **کران کلوستون** نامیده می‌شود و در حدود $1/8T_c$ تسلا است (مسئلهٔ ۱۰-۴ را ببینید). شکل ۱۰-۸ مقادیر B_{c_2} را به صورت تابعی از دما برای برخی از ابررساناهای نوع دوم فرین نشان می‌دهد.

۱۰-۳ معادلهٔ لندن

در بخش ۷-۳-۲ دیدیم که صلب بودن تابع موج الکترون در مقابل اختلال ناشی از اعمال یک میدان مغناطیس مستقیماً منجر به دیا مغناطیس و طرد میدان از ناحیه‌ای، به استثنای یک لایهٔ سطحی به ضخامت حدود ۱۰۰ Å، می‌شود که الکترون آن را اشغال کرده است. بنابراین ضعف اثرهای دیامغناطیسی در بسیاری از مواد توضیح داده می‌شود، زیرا توابع موج عادی ***اتمی***، در



شکل ۱۰-۸ : میدان بحرانی بالایی B_{c_2} ، به صورت تابعی از دما برای برخی از ابررساناهای نوع دو فرین. این نتایج، با مجوز از مرجع زیر، اقتباس شده‌اند:

R. Chevrel, Superconductor Material Science : Fabrication and Applications, ed. S. Foner and B. Schwarts, Plenum, New York (1980).

مقایسهٔ با فاصلهٔ استتار، گستردگی اندکی دارند. دیا مغناطیس کامل ابررساناها حکایت از آن دارد که توابع موجی وجود دارند که در ***سرتاسر*** ماده گسترده‌اند و به راحتی در اثر اعمال میدان مغناطیسی مختل نمی‌شوند.

فریتز لندن برای اولین بار پیشنهاد کرد که جریانهای مسئول برای استتار باید با معادلهٔ زیر توصیف شوند:

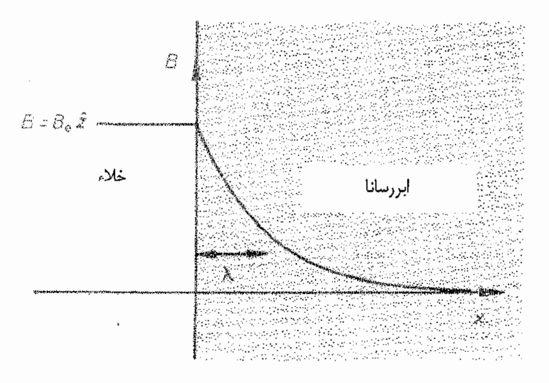
$$Curl\ \mathbf{j} = \frac{-n_s\, e^{2}}{m}\ \mathbf{B} \qquad (۱۰-۹)$$

این معادله به **معادلهٔ لندن** معروف است و تاو عبارت زیر است

$$\mathbf{j} = \frac{n_s\, e^{2}}{m}\,\mathbf{A} \qquad (۱۰-۱۰)$$

که همان معادلهٔ (۷-۳۲) است با این تفاوت که جانشینی $n \to n_s$ این امکان را فراهم می‌سازد که فقط کسر n_s/n از الکترونها ***(کسر ابررسانایی)*** توابع موج صلب دارند. معادلهٔ (۱۰-۹) [یا هم‌ارز آن معادلهٔ (۱۰-۱۰)] را می‌توان به منزلهٔ جانشینی برای قانون اهم، $\mathbf{J} = \sigma\mathbf{E}$، برای توصیف رفتار الکترونهای ابررساننده، تلقی کرد.

برای مشاهده اینکه معادلهٔ (۱۰-۹) اثر مایسنر را توضیح می‌دهد، این معادله را در مورد یک مرز تخت $(x=0)$، که ابررسانا را $((x>0))$ از خلاء $(x<0)$ جدا می‌کند، به کار می‌بریم. میدان مغناطیسی $\mathbf{B} = B_e\ \hat{\mathbf{z}}$ را موازی مرز و در خلاء اعمال می‌کنیم (شکل ۱۰-۹). از ترکیب معادلهٔ



شکل ۱۰-۹: معادلهٔ لندن کاهش نمایی میدان مغناطیسی را درون یک ابررسانا، که ناحیهٔ $x > 0$ را اشغال کرده، پیشگویی می‌کند.

(۱۰-۹) با معادلات ماکسول[1] $curl\, \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J}$ و $div\, \mathbf{B} = 0$، در می‌یابیم که میدان $\mathbf{B}$ درون ابررسانا معادلهٔ زیر را برآورد می‌کند:

$$\lambda^2 \nabla^2 \mathbf{B} = \mathbf{B} \tag{۱۰-۱۱}$$

که در آن λ^2 مطابق بخش ۷-۳-۲ برابر است با $\lambda^2 = m/\mu_0 n_s e^2$. از این رو میدان مغناطیسی در ابررسانا برای هندسهٔ شکل ۱۰-۹ به شکل $\mathbf{B} = B(x)\hat{z}$ است، که در آن $B(x)$ در معادلهٔ زیر صدق می‌کند:

$$\lambda^2 \frac{d^2 B}{dx^2} = B$$

جواب این معادله عبارت است از

$$B(x) = ae^{-x/\lambda} + be^{+x/\lambda} \tag{۱۰-۱۲}$$

که در آن a و b ثابتهای انتگرال‌گیری‌اند. جملهٔ دوم، که در آن B در فواصل دور از مرز، به طور نهایی با x افزایش می‌یابد، غیر فیزیکی و مردود است. لذا برای برقراری شرط $B = B_e$ در $x=0$ باید $a = B_e$ باشد و در نتیجه

$$B(x) = B_e\ e^{-x/\lambda} \tag{۱۰-۱۳}$$

بنابراین، همان‌طور که در شکل ۱۰-۹ نشان داده شده است، میدان مغناطیسی درون ابررسانا به

۱- مهم است دقت کنیم که در این بخش، به جای آنکه جریانهای استتاری را با مغناطش هم ارزشان تعویض کنیم، آنها را به صراحت به حساب می‌آوریم. در این رهیافت برای بررسی رفتار ابررساناها در مقیاس میکروسکوپی، مناسبتر است، قرار دهیم $\mathbf{M} = 0$ و $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$.

طور نمایی با فاصله، با مقیاس طول مشخصهٔ λ، به نام **عمق نفوذ**، نزول می‌کند. برای تخمین λ در $T=0$ فرض می‌کنیم که تمامی الکترونها در این دما ابررسانندهاند و قرار می‌دهیم $n_s = n = 10^{29}\,m^{-3}$، که غلظت نوعی الکترونهای رسانش در یک فلز ابررساناست و به دست می‌آوریم

$$\lambda = \lambda_L(0) = \left(\frac{m}{\mu_0\, n e^2}\right)^{1/2} \approx 170\ \text{Å} \qquad (14\text{-}10)$$

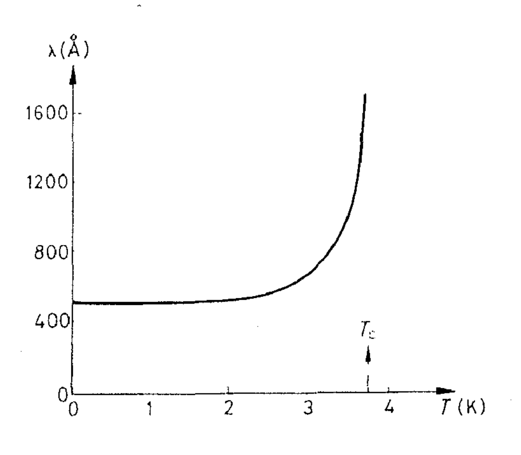
که در آن نماد $\lambda_L(0)$ مبین عمق نفوذ، براساس پیشگویی معادلهٔ لندن در $T=0$ است. اندازه کوچک λ به آن معناست که شار مغناطیسی عملاً از درون نمونه‌های ماکروسکوپی ابررسانا به بیرون رانده می‌شود و اثر مایسنر به این وسیله توضیح داده می‌شود. دقت کنید که در هندسهٔ شکل ۱۰-۹، جریان استتاری در راستای y شارش می‌کنند؛ این جریانها نیز به طور نمایی با عمق مشخصهٔ λ از سطح ابررساناها کاهش می‌یابند.

در دماهای بالاتر انتظار داریم n_s کاهش و λ افزایش یابد. چنین حالتی در شکل ۱۰-۱۰ دیده می‌شود. این شکل وابستگی دمایی اندازه‌گیری شدهٔ λ را برای قلع نشان می‌دهد. این وابستگی دمایی اغلب به درستی با رابطهٔ زیر بیان می‌شود

$$\lambda = \frac{\lambda(0)}{\left[1-(T/T_c)^4\right]^{1/2}}$$

که در آن $\lambda(0)$ مقدار λ در $T=0$ است؛ از این رو λ در حد $T \to T_c$ واگرا می‌شود و $n_s \to 0$.

مقدار اندازه‌گیری شدهٔ $\lambda(0)$ اغلب بزرگتر از $\lambda_L(0)$ است. این دال بر کاستی بنیادی نظریه



شکل ۱۰-۱۰: عمق نفوذ ابررسانایی λ در قلع. مقدار λ در $T=0$ برابر $510\ \text{Å}$ است که می‌تواند با مقدار پیشگویی شده لندن برابر $\lambda_L(0) = 340\ \text{Å}$ مقایسه شود.

لندن نیست؛ این تناقض را می‌توان با تعدیل اندک معادلهٔ (۱۰-۱۰) توجیه کرد؛ این تبدیل به نحوی است که در آن چگالی جریان **J** در نقطهٔ **r** فقط به پتانسیل‌برداری **A** در **r** بستگی نداشته باشد. بلکه به متوسط **A**، که روی تمام نقاط واقع در همسایگی **r** گرفته می‌شود، نیز بستگی داشته باشد. این تعدیل، رابطهٔ جریان - میدان **موضعی** معادلهٔ (۱۰-۱۰) را به یک رابطهٔ **غیرموضعی** تبدیل می‌کند. تغییر مشابهی نیز باید در قانون اهم مربوط به فلزات عادی، در موردی که میدان الکتریکی در مقیاس مسافت آزاد میانگین l الکترون، سریعاً تغییر می‌کند، وارد کرد. چنین وضعیتی در فلزات خالص عادی در بسامدهای بالا و دمای پایین، که عمق پوستی الکترومغناطیسی (که مقیاس طولی تغییرات E را به دست می‌دهد) معمولاً کمتر از l است و در نتیجه چگالی جریان در نقطهٔ **r** به متوسط میدان الکتریکی در ناحیه‌ای با اندازهٔ تقریبی l در اطراف **r** بستگی دارد، پیش می‌آید؛ تعمیم ضروری قانون اهم نیز رابطه‌ای غیر موضعی بین **J** و **E** است. پیپارد از شباهت این مسئله با حالت بهنجار بهره‌برداری کرد و پیشنهاد کرد که عمق نفوذ ابررساناهای خالص را در صورتی می‌توان توجیه کرد که رابطه‌ای غیر موضعی بین **J** و **E** برقرار باشد[1]، که در آن متوسط پتانسیل‌برداری روی فاصلهٔ ξ گرفته شود. به طوری که

$$\xi \approx \frac{\hbar v_F}{k_B\ T_c} \qquad (\text{(۱۰-۱۵)})$$

(برای $T_c = 10K$ و $v_F = 10^6\ ms^{-1}$ داریم $\xi \approx 10^4$ Å).

بعداً نشان می‌دهیم که (بخش ۱۰-۴) که فاصلهٔ مشخصه‌ای به این شکل به طور طبیعی در نظریهٔ ابررسانایی ظاهر می‌شود. در فلزات ناخالص ابررسانا با l کمتر از ξ، مسافت آزاد میانگین، در تعیین گسترهٔ غیر موضعی بودن، جانشین ξ می‌شود و در آن صورت λ به l بستگی خواهد داشت. بعداً اساس پیشنهادهای پیپارد به وسیلهٔ نظریهٔ میکروسکوپی ابررسانایی تأیید شد.

بررسی قلمروی که در آن می‌توان معادلهٔ لندن را از فرض نامتناهی بودن رسانندگی به دست آورد، جالب توجه است؛ برای انجام این کار زمان پراکندگی τ ی الکترون را در معادلهٔ (۳-۲۳) بینهایت می‌گیریم. معادلهٔ حاصل برای شتاب

$$m_e\, d\mathbf{v}\ /dt = -e\mathbf{E}$$

همراه با $\mathbf{J} = -\mathbf{n}_s e v$ و قانون فاراده، $curl\ \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{B}}$، به مشتق زمانی معادلهٔ (۱۰-۹) منجر می‌شود. به دست آوردن معادلهٔ لندن، با انتگرالگیری از این معادله شامل فرضی بر ثابت انتگرالگیری است، که این کار هم‌ارز پذیرفتن اثر مایسنر است. این امر بار دیگر نشان می‌دهد که

۱- توجه کنید که برای تغییر سریع **A** درون ابررسانا به بسامدهای بالا نیازی نیست، حتی با یک میدان dc نیز، اثر مایسنر تضمین می‌کند که **A** در مقیاس طول λ تغییر می‌کند.

ابررسانایی چیزی بیش از فقط نامتناهی بودن ابررسانندگی است.

۱۰-۴ نظریهٔ ابررسانایی

فقط توصیفی کیفی از نظریهٔ میکروسکوپی بسیار موفق ابررسانایی را، که در سال ۱۹۵۷ میلادی توسط باردین، کوپر وشریفر (BCS) عرضه شد، به طور خلاصه ارائه می‌کنیم؛ جزئیات کمی نظریهٔ BCS فنونی را می‌طلبد که برای این کتاب خیلی پیشرفته‌اند.[۱]

۱۰-۴-۱ گاف انرژی و جفتیدگی الکترون

در بخش قبل دیدیم که وابستگی دمایی عمق نفوذ دلالت بر یک چگالی n_s از الکترونهای ابررسانندگی دارد که از صفر در T_c تا مقدار کامل چگالی الکترونی در $T=0$ افزایش می‌یابد. این رفتار با حضور یک گاف انرژی Δ، که حالتهای الکترونی ابررسانده را از حالتهای الکترونهای "بهنجار" جدا می‌کند، سازگار است. شواهد متعددی بر حضور چنین گافی وجود دارد؛ هم آزمایش و هم نظریه نشان می‌دهند که Δ وابسته به دما است، در T_c صفر می‌شود و مقدار بیشینهٔ خود $\Delta(0)$ را در $T=0$ کسب می‌کند. در دماهای پایین ($T \ll T_c$) انتظار می‌رود که تعداد الکترونهای (بهنجار) برانگیخته به صورت $exp[-\Delta(0)/k_B T]$ نزول کند و این وابستگی دمایی منعکس کنندهٔ سهم الکترونی در ظرفیت گرمایی است؛ در عمل نشان داده شده است که این انتظار بجاست (شکل ۱۰-۶ را ببینید) و $\Delta(0)$ از مرتبهٔ $k_B T_c$ است.

شواهد مستقیم برای وجود گاف انرژی به وسیلهٔ اندازه‌گیریهای جذب امواج الکترومغناطیسی فراهم آمده است. در دمای پایین ($T \ll T_c$) جذب در بسامدهای پایین بینهایت کوچک است اما،وقتی انرژی فوتون آن قدر باشد که الکترونها را در طول گاف انرژی برانگیزد، جذب به شدت افزایش می‌یابد. بسامد لازم برای شروع جذب، با رابطهٔ زیر بیان می‌شود

$$h\nu = 2\Delta(0) \qquad (۱۰\text{-}۱۶)$$

ضریب ۲ به این دلیل ظاهر می‌شود که جذب یک فوتون دو الکترون برانگیخته شده تولید می‌کند. توضیح طبیعی این موضوع به وسیلهٔ نظریهٔ BCS ابررسانایی عرضه می‌شود. براساس این نظریه، الکترونهای ابررسانده به صورت زوج به هم مقید می‌شوند و زوجهای معروف به

۱- برای مجموعه‌ای عالی از مقالات مروری راجع به ابررسانایی توصیه می‌شود خواننده به کتاب زیر مراجعه کند:

Superconductivity, ed. R. D. Parks, Marcel Dekker, New York (1969).

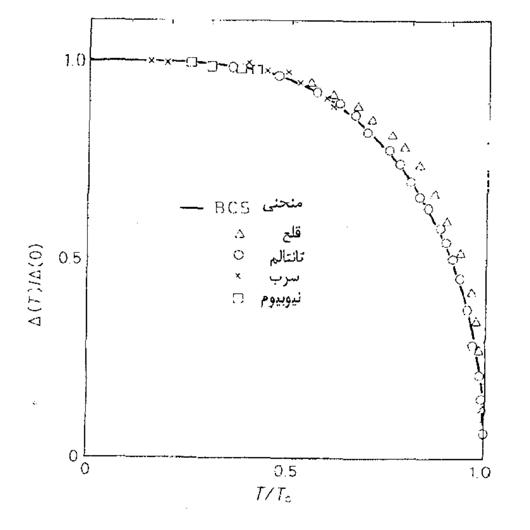
زوجهای کوپر را می‌سازند. بنابراین 2Δ انرژی بستگی یک زوج کوپر است و معادلهٔ (۱۰-۱۶) شکستن یک زوج را در اثر جذب یک فوتون توصیف می‌کند. برهم کنش جاذبه‌ای که زوجها را به هم پیوند می‌دهد از ارتعاشات شبکه‌ای ناشی می‌شود (بخش ۱۰-۴-۳).

تابع موج تمامی زوجها باید یکسان باشد تا کاهش انرژی ناشی از برهم کنش جاذبه‌ای را بیشینه کند؛ انرژی بستگی یک زوج کوپر، وقتی که همهٔ زوجها در یک حالت باشند، بیشترین است. بنابراین گفته می‌شود که ابررسانایی یک **پدیدهٔ تعاونی** است؛ فرومغناطیس مثال دیگری از یک پدیده تعاونی است، زیرا هر چه صف آرایی اسپین‌ها بهتر باشد، میدان مولکولی، که مسئول آن هم‌آرایی است، بزرگتر می‌شود (بخش ۸-۳-۱ را ببینید). وجود تابع موجی مشترک برای زوجهای کوپر صلب بودن تابع موج را، که منجر به اثر مایسنر می‌شود فراهم می‌کند و مسئول رسانندگی نامتناهی نیز هست (بخش ۱۰-۴-۵).

در $T=0$ همهٔ الکترونها به صورت زوج در می‌آیند ولی در $T>0$ برخی از زوجها در اثر برانگیزش گرمایی شکسته می‌شوند. به دلیل ماهیت تعاونی ابررسانایی، انرژی بستگی سایر زوجها کاهش می‌یابد. کاهش حاصل در گاف انرژی اندازه‌گیری شده را می‌توان در شکل ۱۰-۱۱ دید؛ $\Delta(T)$ در $T=T_c$ با شیب نامتناهی صفر می‌شود. مشارکت در یک تابع موج مشترک به وسیلهٔ زوجها در تمام دماهای زیر T_c وجود دارد و نظم حاصل مسئول آنتروپی کمتر در حالت ابررسانایی است.

فاصلهٔ متوسط بین الکترونهای زوج کوپر، در یک فلز خالص در دمای $T=0$، از مرتبهٔ

$$\xi_0 = \hbar v_F / \pi \Delta(0) \tag{۱۰-۱۷}$$



شکل ۱۰-۱۱: وابستگی دمایی گاف انرژی ابررسانایی. منحنی توپر پیشگویی نظریهٔ BCS است [این منحنی با مجوز از مرجع زیر اقتباس شده است:

P. Townsend and J. Sutton, Phys. Rev. **128**, *591 (1962)*]

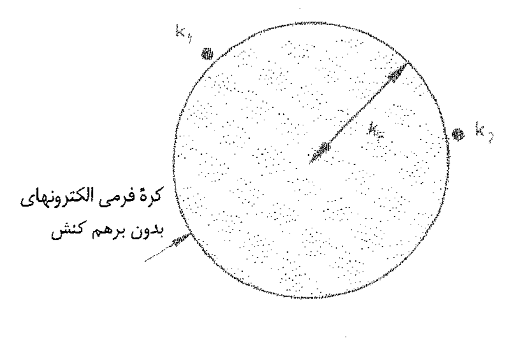
است. $\xi_\circ$ به **طول همدوسی** BCS موسوم است و نقش مهم در نظریهٔ ابررسانایی ایفا می‌کند. چون $\Delta(\circ) \approx k_B T_c$ [نظریهٔ BCS پیشگویی می‌کند که $\Delta(\circ) = 1/76 k_B T_c$] این اساساً $\xi_\circ$ است که گسترهٔ غیر موضعی بودن [معادلهٔ (۱۰-۱۵)] را در رابطهٔ جریان- میدان مربوط به الکترونهای ابررساننده در یک فلز خالص تعیین می‌کند؛ جریان عبارت است از شارش زوجهای کوپر و هر زوج کوپر تحت‌تأثیر پتانسیل‌برداری، که روی تابع موج آن زوج متوسط‌گیری می‌شود، قرار می‌گیرد.

* ۱۰-۴-۲ مسئلهٔ کوپر

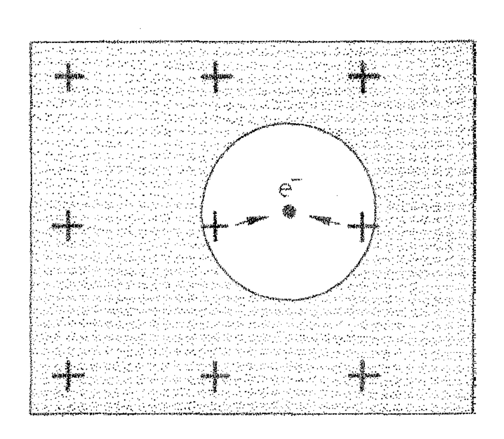
در سال ۱۹۵۶ میلادی کوپر با حل مسئلهٔ ساده‌ای، برای نظریهٔ *BCS* الهام گرفت. وی معادلهٔ شرودینگر را برای دو الکترون برهم کنش‌کننده در حضور یک کرهٔ فرمی متشکل از الکترونهای بدون برهم کنش، مطابق شکل ۱۰-۱۲، حل کرد. این محاسبه را نمی‌توان به طور مستقیم در مورد یک فلز حقیقی به کار برد، زیرا حذف برهم کنش بین تمامی الکترونهای رسانده، جز بین دو تای از آنها، امکان ناپذیر است، ولی این محاسبه نوع انرژی را، که این برهم کنش ممکن است تولید کند، نشان می‌دهد. تابع موج این دو الکترون را می‌توان به صورت ترکیبی خطی از امواج تخت بسط داد [معادلهٔ (۳-۳) را ببینید]

$$\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=\sum_{\mathbf{k}_1}\sum_{\mathbf{k}_2} f(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2)e^{i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}_1}\, e^{i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}_2} \qquad (10\text{-}18)$$

که در آن نقش الکترونهای بدون برهم کنش آن است که مجموعیابی را به حالتهای موج تخت خارج کرهٔ فرمی ($|\mathbf{k}_1|, |\mathbf{k}_2| > k_F$) محدود می‌سازد. کوپر در جستجوی حالتهای به این شکل با انرژی‌ای کمتر از $2\varepsilon_F$، انرژی دو الکترون "بهنجار" در سطح فرمی، بود. چنین حالتهایی متناظرند با حالتهای مقید دو الکترون و وجود آنها حاکی از آن است که حالت



شکل ۱۰-۱۲ : مسئلهٔ کوپر. دو الکترون برهم کنش کننده، که به وسیلهٔ کرهٔ فرمی الکترونهای بدون برهم کنش به حالتهای $\mathbf{k}_1$ و $\mathbf{k}_2$ خارج سطح فرمی مقید شده‌اند.



(الف)

فونون

الکترون ۲

الکترون ۱

(ب)

(الف) یک الکترون، به دلیل دافعهٔ کولنی، به وسیلهٔ حفرهٔ استتار کننده در شارهٔ الکترونی طی می‌شود. این حفره به طور متوسط بار مثبتی برابر ولی مخالف بار الکترون دارد. الکترون مغزهای یونی با بار مثبت در همسایگی خود را، جذب می‌کند. چگالی افزایش یافتهٔ بار مثبت، پس از دور شدن الکترون، پا برجا می‌ماند و می‌تواند الکترون دیگری را جذب کند. **(ب)** برهم‌کنش جاذبهٔ بین دو الکترون را می‌توان به منزلهٔ مبادلهٔ یک فونون مجازی تصور کرد. این فونون مجازی است، زیرا یک الکترون نمی‌تواند تغییر انرژی زیادی ($\sim\hbar\omega_D$) را، در دماهای پایین ($T\ll\theta_D$)، تحمل کند تا یک فونون حقیقی با طول موج کوتاه را تولید کند. یک فونون مجازی به وسیلهٔ یک الکترون گسیل می‌شود و آن فونون، به وسیله الکترون دیگر در چنان زمان کوتاهی (کمتر از $1/\omega_D$) جذب می‌شود که "وجود" آن با رابطهٔ عدم قطعیت انرژی-زمان مجاز می‌شود. اندازه حرکت، در تک تک فرایندهای گسیل و جذب پایسته است، ولی انرژی فقط به طور کلی پایسته است.

شکل ۱۰-۱۳

بهنجار، که با کرهٔ فرمی نمایش داده می‌شود، در مقابل تشکیل زوجهای الکترون مقید ناپایدار است.

مرکز جرم این دو الکترون، در پایین‌ترین انرژی، ساکن است و این وقتی حاصل می‌شود که فقط حالتهای با اندازه حرکت برابر و در جهتهای مخالف هم، $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}$، را در بسط معادلهٔ (۱۰-۱۸) منظور کنیم، که در این صورت معادله به صورت زیر ساده می‌شود:

$$\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=\sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k})\, e^{i\mathbf{k}.(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)} \qquad (۱۰\text{-}۱۹)$$

که در آن مجموعیابی باز هم محدود به حالتهای $\mathbf{k}$ واقع در خارج سطح فرمی است. کوپر دریافت که حالتهای مقید در صورتی وجود خواهند داشت که برهم کنش بین دو الکترون، هر چند برهم کنش ضعیف، ولی جاذبه باشد؛ این امر تعجب‌آور بود، چرا که حالتهای مقید دو ذره موجود در خلاء تنها در صورتی وجود دارند که پتانسیل جاذبه از یک مقدار آستانه بیشتر باشد. BCS، با استفاده از این دستاورد کوپر، این برونیابی خام را انجام دادند که زوجهای مقید کوپر، وقتی تمامی الکترونها نیز با یکدیگر برهم کنش کنند، نتیجه می‌شوند.

*** ۱۰-۴-۳ منشاء برهم کنش جاذبه**

برهم کنش جاذبهٔ دو الکترون، با توجه به نیروی دافعهٔ بزرگی، که بین دو ***الکترون منزوی*** وجود دارد، امکانی غیرمحتمل به نظر می‌آید ولی در فصل ۱۳ خواهیم دید که برهم کنش کولنی مؤثر بین دو الکترون در یک فلز، در اثر حضور سایر الکترونها و یونهای مثبت خیلی کاهش می‌یابد. هر الکترون سایر الکترونها را از همسایگی خود می‌راند و به این وسیله یک حفره در "شاره" الکترونی تولید می‌کند. اندازهٔ این حفره از مرتبهٔ اندازهٔ اتم است و به طور متوسط حاوی بار مثبتی از یونها برابر و مخالف با بار الکترون است [شکل ۱۰-۱۳ (الف)]. بنابراین بار خالص در همسایگی الکترون تقریباً صفر است و برهم کنش مؤثر این الکترون با الکترون دیگر واقع در بیرون حفرهٔ استتار شده ضعیف است.

نیروی جاذبه از اینجا ناشی می‌شود که یک الکترون یونهای مثبت را جذب می‌کند، به نحوی که در حین حرکت درون فلز، ردّپایی از چگالی افزایش یافتهٔ بار مثبت در پشت خود بر جای می‌گذارد [شکل ۱۰-۱۳ (الف)]. از آنجا که یونها حرکتی آهسته‌تر از الکترونها دارند، این ردّپا، پس از دور شدن الکترون، پابرجا می‌ماند و می‌تواند الکترون دیگری را جذب کند. این جاذبه بسیار کوتاه‌برد است. زیرا مسافت ردّپا از مرتبهٔ فاصلهٔ بین اتمی است، ولی تأخیری است زیرا الکترونی، که ایجاد و ردّپا را سبب شده است، پیشاپیش دور شده است. چون حرکت یونی، ارتباط برهم کنشی بین دو الکترون را برقرار می‌سازد، گفته می‌شود که جاذبه از طریق مبادلهٔ فونونهای مجازی نتیجه می‌شود [شکل ۱۰-۱۳ (ب)]. ماهیت تفصیلی این برهم کنش در تعیین دمای گذار ابررسانا از اهمیت برخوردار است، ولی رفتار کیفی ابررسانا در دمای زیر T_c تقریباً به طور کامل با حضور زوجهای کوپر تعیین می‌شود. در واقع، BCS با تعویض برهم کنش تأخیری کوتاه برد واقعی با یک برهم کنش ساده‌تر لحظه‌ای ساختگی با گستره‌ای تقریباً برابر با v_F / ω_D، اغلب خواص ابررساناها را با موفقیت محاسبه کردند. این گستره فاصله‌ای را، که یک الکترون در طول زمان مشخصهٔ حرکت یونی (حدود $1/\omega_D$) طی می‌کند، به حساب می‌آورد.

* ۱۰-۴-۴ ماهیت حالت پایهٔ ابررسانایی

تمام الکترونها براساس نظریهٔ BCS، در دمای $T=0$ زوج می‌شوند. از آنجا که توابع موج همهٔ زوجها یکسانند، ابررسانایی اغلب به منزلهٔ یک چگالش بوزونی از زوجهای کوپر توصیف می‌شود (صفحهٔ ۲۹۲ کتاب مندل [۲] را ببینید)[1]. رسیدن به اینکه چگونه می‌توان تابع موجی متناظر با چنین حالت پایه‌ای نوشت، کارآموزنده‌ای است. تابع موج مشترک همهٔ زوجها را می‌توان به صورت موجهای تخت نظیر معادلهٔ (۱۰-۱۹) بسط داد، به جز آنکه قید محدودیت به حالتهای $|k|>k_F$ برداشته می‌شود، چراکه در این حالت هیچ کرهٔ فرمی بدون برهم‌کنش وجود ندارد. تابع موج زوج در اغلب (و شاید هم تمامی) ابررساناهای شناخته شده اساساً تقارن کروی دارد، $\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=\psi(|\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2|)$، در نتیجه زوج کوپر اندازه حرکت زاویه‌ای مداری ندارد؛ تقارن کروی به وسیلهٔ ناهمسانگردی ساختار بلور اندکی به هم می‌خورد که ما از آن صرفنظر می‌کنیم. این تقارن کروی متناظر است با $g(\mathbf{k})$ ای، که فقط به بزرگی $\mathbf{k}$ بستگی دارد و بنابراین این تابع موج تحت تعویض $\mathbf{r}_1$ و $\mathbf{r}_2$ متقارن است. تابع موج‌پاد متقارن زوج، ϕ (۱و۲)، را می‌توان از ترکیب این تابع موج فضایی با تابع موج پاد متقارن یگانهٔ اسپینی به دست آورد. از این رو

$$\phi(1,2)=\psi(|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|)\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow-\downarrow\uparrow) \qquad (۱۰\text{-}۲۰)$$

بنابراین الکترونهای زوج کوپر، اسپینهای مخالف هم دارند. تابع موج مربوط به N الکترون را، که $N/2$ زوج دارد که تماماً حالت یکسان دارند، می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\psi(1,2,3,4,\ldots,N)=P\{\phi(1,2)\,\phi(3,4)\ldots\phi(N-1,N)\} \qquad (۱۰\text{-}۲۱)$$

که در آن P عملگری است که تابع موج حاصل ضربی درون آکولاد را، تحت تعویض هر دو الکترون، پاد متقارن می‌سازد. بحث نخواهیم کرد که این عمل در حالت کلی چگونه انجام می‌شود، ولی با نوشتن تابع موج به طور صریح نشان خواهیم داد که این عملگر چگونه در مورد دو زوج از الکترونها عمل می‌کند:

$$\psi(1,2,3,4)=P\{\phi(1,2)\ \phi(3,4)\}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{3}}\ [\phi(1,2)\phi(3,4)-\phi(1,3)\phi(2,4)-\phi(1,4)\phi(3,2)]$$

۱- گرچه یک زوج قویاً مقید از فرمیونها رفتاری شبیه یک بوزون دارد، ولی تأکید بیش از حد بر این ایدهٔ ساده در مورد زوجهای کوپر خطراتی را به همراه دارد؛ زوجهای کوپر به طور ضعیف مقیداند و یک همپوشانی قوی بین توابع موج مربوط به زوجهای همسایه وجود دارد.

معادلهٔ (۱۰-۲۱) اساساً تابع موج حالت پایهٔ نظریهٔ BCS است.

در همهٔ ابررساناهایی که در آنها توضیح بدون ابهام ماهیت زوج شدگی امکانپذیر است، روشن است که زوجهای کوپر اندازه حرکت زاویه‌ای مداری صفر دارند. ولی، ماهیت زوج‌شدگی در ابررساناهای با دمای گذار بالا (ابررساناهای گرم) هنوز تثبیت نشده است. برخی ابررساناهای فرمیون سنگین[1] نیز ممکن است اندازه حرکت زاویه‌ای زوج شدگی متناهی‌ای داشته باشند.

مایع $He^{۳}$، به دلیل زوج شدگی کوپر، یک گذار ابرشارگی به حالت با $L=۱$ را تحمل می‌کند و اعتقاد بر آن است که نوترونها در ستاره‌های نوترونی نیز در حالت زوج شدهٔ کوپری با اندازه حرکت زاویه‌ای متناهی هستند؛ ولی این دستگاههای **خنثای** فرمی را نمی‌توان به عنوان ابررسانا توصیف کرد!

۱۰-۴-۵ توضیح در بارهٔ رسانندگی نامتناهی

برای آنکه توضیحی کیفی در بارهٔ رسانندگی نامتناهی ارائه دهیم ابتدا باید توصیف کنیم چگونه امکان دارد با دادن یک اندازه حرکت زاویه‌ای متناهی مرکز جرم به همهٔ زوجها به یک حالت حامل جریان دست یافت. یک چگالی جریان یکنواخت متناظر است با تابع موج مربوط به زوج به شکل زیر[2]:

$$\phi = e^{i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\,\phi_{۰} \qquad (۱۰\text{-}۲۲)$$

که در آن $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_{۱} + \mathbf{r}_{۲})/۲$ مکان مرکز جرم دو الکترون و $\phi_{۰}$ تابع موج ساکن است. معادلهٔ (۱۰-۲۲) به اندازه حرکت $\hbar\mathbf{q}$ی مرکز جرم و بنابراین به سرعت $\mathbf{v}$ مربوط است، به طوری که

$$\hbar\mathbf{q} = ۲m\mathbf{v}$$

چون بار زوج کوپر $-۲e$ است، چگالی جریان حاصل برای n_s الکترون ابررسانده (یا $n_s/۲$

۱- به موادی نظیر $UPt_{۳}$ و $UBe_{۱۳}$ به این دلیل مواد فرمیون سنگین گفته می‌شود که آنها در دماهای پایین ظرفیت گرمایی الکترونی بسیار بزرگی دارند، که این هم‌ارز جرم مؤثر ظرفیت گرمایی زیاد برای الکترونهاست (بخش ۳-۲-۳). به نظر می‌رسد که این از سهم الکترونهای $5f$ موجود در اتمهای U در چگالی حالتها در سطح فرمی ناشی می‌شود.

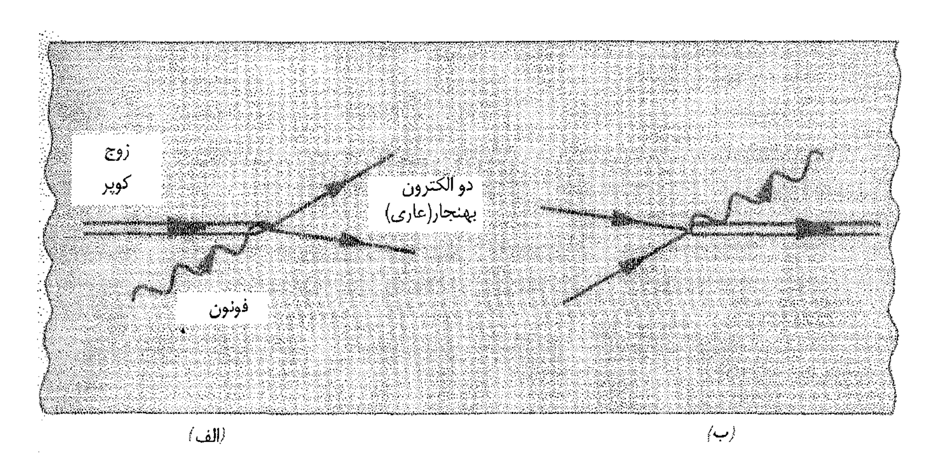
۲- برای سادگی چگالی جریان را یکنواخت فرض می‌کنیم. توجه کنید که در عمل چگالی جریانی را که در فضا یکنواخت باشد فقط می‌توان در یک رسانا (مثل یک لایهٔ نازک یا سیم ظریف)، که در آن یک یا چند بعد رسانا در مقایسه با عمق نفوذ λ کوچک باشد، تولید کرد.

زوج) به ازای واحد حجم به قرار زیر است :

$$\mathbf{J}=-\frac{n_s}{۲}\ ۲e\frac{\hbar\mathbf{q}}{۲m} \tag{۲۳-۱۰}$$

سیمی را در نظر بگیرید که حامل جریانی از زوجهای کوپر از این نوع باشد. باید توضیح دهیم پراکندگی الکترونها به وسیلهٔ فونونها و ناخالصیها اثری در تولید مقاومت الکتریکی ندارند. فرایندی که در آن یک زوج کوپر، فونونی با انرژی از مرتبهٔ $۲\Delta(T)$ را جذب می‌کند و الکترون بهنجار تولید می‌شود (شکل ۱۰-۱۴) بی شک روی می‌دهد، همان طور هم فرایند معکوس که در آن دو الکترون بهنجار با گسیل کردن یک فونون ترکیب می‌شوند تا یک زوج کوپر بسازند. در واقع این فرایندها، به خاطر حفظ تعادل دینامیکی بین غلظتهای زوجهای کوپر و الکترونهای بهنجار، با آهنگ یکسان روی می‌دهند.

چون وقتی زوجهای کوپر جملگی در یک حالت هستند، انرژی کمتر است، زوجهایی که به وسیلهٔ گسیل فونون تولید می‌شوند همیشه تابع موج معادلهٔ (۱۰-۲۲) را دارند؛ ***انرژی بستگی آنها صفر می‌شود، مگر آنکه حرکت مرکز جرم آنها همان حرکت زوجهای موجود باشد.*** از این رو جریان تحت تأثیر پراکندگی فونونی نیست. از آنجا که پراکندگی ناخالصی، کشسان



شکل ۱۰-۱۴: فرایندهای پراکندگی فونونی در سیمی که حامل ابر جریان است؛ (الف) جذب یک فونون به وسیلهٔ یک زوج کوپر با اندازه حرکت $\hbar\mathbf{q}$، دو الکترون بهنجار را تولید می‌کند؛ (ب) دو الکترون بهنجار همراه با گسیل یک فونون با یک دیگر ترکیب می‌شوند و یک زوج کوپر با اندازه حرکت $\hbar\mathbf{q}$ می‌سازند.

است، ناخالصیها هرگز نمی‌توانند زوجهای کوپر را پراکنده کنند؛ تغییر در اندازه حرکت یک تک زوج کوپر از دست رفتن انرژی بستگی زوج را به همراه دارد و بنابراین یک فرایند کشسان است. جریان زوج را فقط با یک عامل، که همهٔ زوجها را به طور یکسان تحت تأثیر قرار می‌دهد، نظیر میدان الکتریکی، می‌توان تغییر داد.

۱۰-۵ پدیده‌های ماکروسکوپی کوانتومی

۱۰-۵-۱ پارامتر نظم ابررسانایی

از آنجاکه زوجهای کوپر تابع موج مشترک دارند، رفتار الکترونهای ابررساننده به ***طور کامل*** با این تابع موج مشخص می‌شود؛ اینکه تابعی از فقط دو متغیر مکان برای توصیف حدود 10^{29} الکترون در هر متر مکعب مورد نیاز است در تضاد کامل با مورد فلز بهنجار است که در آن رفتار الکترونها تنها با تعیین تمامی حالتهای تک ذره‌ای اشغال شده مشخص می‌شود. همدوسی در تابع موج وابسته به اشغال ماکروسکوپی حالت کوانتومی یکسان، به وسیلهٔ زوجهای کوپر، سبب می‌شود که ابررساناها اثرهای مکانیک کوانتومی در مقیاس ماکروسکوپی از خود بروز دهند. همین وضعیت برای فوتونها پیش می‌آید؛ اشغال ماکروسکوپی یک تک حالت کوانتومی منجر به میدان الکتریکی مشاهده‌پذیر در مقیاس ماکروسکوپی می‌شود.

برای مقاصدی بیشمار، حرکت نسبی دو الکترون موجود در زوج را می‌توان نادیده گرفت و زوج را به منزلهٔ یک ذرهٔ نقطه‌ای تلقی کرد. تنها لازم است وابستگی تابع موج به مختصهٔ مرکز جرم را در نظر گرفت و این با **پارامتر نظم** $\psi(\mathbf{r})$ بیان می‌شود؛[1] از این رو، مثلاً از معادلهٔ (۱۰-۲۲) می‌بینیم که پارامتر نظم، توصیف کنندهٔ حالتی با چگالی جریان یکنواخت به قرار زیر است:

$$\psi(\mathbf{r})=\psi_0 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \qquad (۱۰\text{-}۲۴)$$

که در آن ψ_0 ثابت است. اگر $\psi(\mathbf{r})$ را به صورت موج ذره‌ای با بار $-2e$ و جرم $2m$ (فراخور یک زوج کوپر) قلمداد کنیم، بسیاری از خواص ابررساناها به دست می‌آیند.

چگالی جریان همبسته به چنین تابع موجی، با تعویضهای $e\to 2e$ و $m\to 2m$ در معادلهٔ (پ ۸) از پیوست (پ)، بیان می‌شود:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r})=+\frac{ie\hbar}{2m}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi-\psi\vec{\nabla}\psi^*\right)-\frac{2e^2}{m}\psi^*\psi\mathbf{A} \qquad (۱۰\text{-}۲۵)$$

۱- نظریهٔ BCS مانند نظریهٔ وایس در فرومغناطیس (بخش ۸-۳)، یک نظریهٔ میدان میانگین است؛ پارامتر نظم $\psi(\mathbf{r})$، میدان میانگین این نظریه و بنابراین شبیهٔ مغناطش فرو مغناطیس است. نظریهٔ میدان میانگین ابررسانایی موفق‌تر از این نظریه در فرومغناطیس است، زیرا اثرهای افت‌وخیز در نمونه‌های ماکروسکوپی ابررسانا آن قدر نزدیک T_c روی می‌دهند که مشکل می‌توان آنها را مشاهده کرد.

عامترین صورت $\psi(\mathbf{r})$ عبارت است از

$$\psi(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|\, e^{i\theta(\mathbf{r})} \tag{۲۶-۱۰}$$

با درج این مقدار در معادلهٔ (۱۰-۲۵) در می‌یابیم که

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -(e/m)\, |\psi(\mathbf{r})|^{2}\, (\hbar \vec{\nabla}\theta + 2e\mathbf{A}) \tag{۲۷-۱۰}$$

این معادله نقطهٔ شروع مبحث پدیدهٔ کوانتومی ماکروسکوپی خواهد بود، ولی نخست آن را برای به دست آوردن مجدد دو نتیجه، که قبلاً به دست آورده‌ایم، به کار خواهیم برد:

(۱) قرار دادن $\theta(\mathbf{r}) = \mathbf{q}.\mathbf{r}$ [معادلهٔ (۱۰-۲۴)] و $\mathbf{A} = 0$ (مسئلهٔ ۱۰-۸ را ببینید) در معادلهٔ (۱۰-۲۷)، معادلهٔ (۱۰-۲۳) را در صورتی به دست می‌دهد که پارامتر نظم بهنجار باشد، به گونه‌ای که

$$|\psi(\mathbf{r})|^{2} = n_s/2 = \text{چگالی زوج کوپر}$$

(۲) گرفتن تاو از معادلهٔ (۱۰-۲۷) و با فرض آنکه چگالی زوج کوپر $|\psi(\mathbf{r})|^{2}$ مستقل از مکان (یعنی تابع موج صلب) است، معادلهٔ لندن (۱۰-۹) را عرضه می‌کند[1].

۱۰-۵-۲ کوانتش شار

وقتی ابررسانا در حالت مایسنر است، در نقاط دور از سطح آن داریم $\mathbf{j} = 0$. در آن صورت معادلهٔ (۱۰-۲۷) به صورت زیر در خواهد آمد:

$$\hbar \vec{\nabla}\theta = -2e\mathbf{A} \tag{۲۸-۱۰}$$

از این معادله روی منحنی بستهٔ C واقع در درون ابررسانا انتگرال می‌گیریم

$$\hbar \oint_c \vec{\nabla}\theta . d\mathbf{l} = \hbar \Delta\theta = -2e \oint_c \mathbf{A} . d\mathbf{l} \tag{۲۹-۱۰}$$

چون پارامتر نظم $\psi(\mathbf{r})$ رفتاری مانند یک تابع موج دارد، باید تک مقدار باشد و تغییر فاز $\Delta\theta$

۱- چشم‌پوشی از ساختار داخلی تابع موج زوج کوپر موجب می‌شود که، به جای رسیدن به رابطهٔ غیر موضعی واقعی، به رابطهٔ جریان- میدان موضعی لندن دست یابیم. برای توضیح در بارهٔ تفاوت بین معادلات (۱۰-۱۰) و (۱۰-۲۷) مسئلهٔ ۱۰-۹ را ببینید.

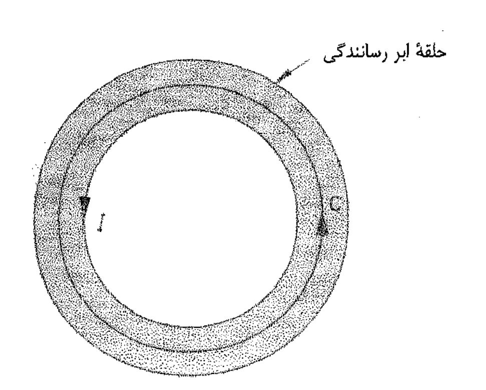
در حلقه‌ای بسته باید $\pm 2\pi n$ باشد، که در آن n عددی است درست مثبت (یا صفر). انتگرال $\oint_C \mathbf{A}.d\mathbf{l}$ را، می‌توانیم مانند معادلهٔ (۷-۲۸)، با استفاده از قضیهٔ استوکس تبدیل کنیم تا نشان دهیم این انتگرال با شار مغناطیسی ϕی گذرنده از منحنی C برابر است. با این عمل داریم

$$\phi = \pm \frac{2\pi n \hbar}{2e} = \pm \frac{nh}{2e} = \pm n\phi_0 \qquad (۱۰\text{-}۳۰)$$

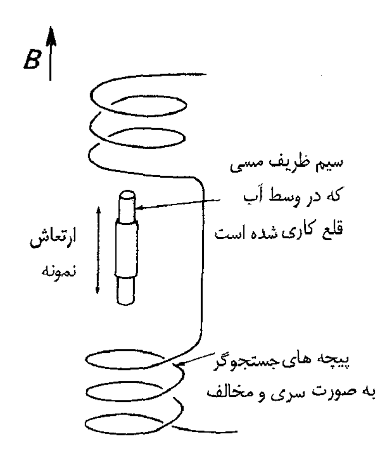
این معادله نشان می‌دهد که شار گذرنده از هر منحنی بسته، که روی آن $\mathbf{j}$ در درون ابررسانا صفر است، با واحد کوانتوم شار $\phi_0 = h/2e = 2/07 \times 10^{-15}\ T\text{-}m^2$ کوانتیده است.

با به کار بردن این نتیجه در مورد شار مربوط به جریان ماندگار جاری در یک حلقهٔ ابررسانا (شکل ۱۰-۱۵) می‌بینیم که این جریان نیز کوانتیده است و این امر مسئلهٔ پایداری جریان راروشنتر می‌کند. تغییر در جریان متناظر با تغییر در شار گذرنده از این حلقه برابر با یک کوانتوم شار، تغییری در $\Delta\theta$ به قدر 2π به همراه خواهد داشت. چنین تغییری را فقط در صورتی می‌توان به دست آورد که همدوسی تابع موج ابررسانایی به نحوی به طور موقت از بین برود، پیامد این عمل، از دست رفتن انرژی چگالش زوجهای کوپر است. از این رو سد انرژی بزرگی در مقابل چنین تغییری وجود دارد. به خاطر انرژی همبسته با جریان و شارگیر افتاده در درون ابررسانا، حالتی با یک جریان ماندگار متناهی اکیداً شبه پایدار است، ولی عملاً عمری نامتناهی دارد.

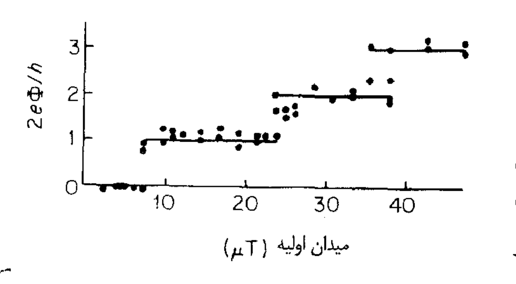
شکل ۱۰-۱۶ طرحوارهٔ آزمایشی را نشان می‌دهد که در آن حلقه‌ای از یک ابررسانا برای اندازه‌گیری کوانتوم شار به کار رفت. در این آزمایش، نمونه به صورت لایهٔ نازکی از قلع بود که روی سیم نازک مسی با طول چند میلیمتر و قطر حدود $10\ \mu m$ به صورت الکترولیزی نشانده شده بود (به یاد آورید که مس در مقایسه با ابررساناها یک عایق است!)؛ استفاده از سیمی به این باریکی به این دلیل بود که در آن یک کوانتوم شار با میدان مناسبی حدود



شکل ۱۰-۱۵: انتگرالگیری از معادلهٔ(۱۰-۲۸) روی مسیر بستهٔ C ثابت می‌کند که شار مغناطیسی گذرنده از حلقهٔ ابررسانا کوانتیده است. جریان ماندگار I، که شار را باعث شده است، روی سطح درونی حلقه در شارش است.



(الف) ترتیب آزمایش اندازه‌گیری کوانتوم شار



(ب) پس از اینکه حلقهٔ ابررسانندهٔ واقع در میدان مغناطیسی تا دمایی زیر دمای گذارش سرد می‌شود، و آنگاه میدان حذف می‌شود، شار درون حلقه‌گیر می‌افتد[1].

شکل ۱۰-۱۶

$10\mu T$ در درون حلقه متناظر بود. نمونه در یک میدان مغناطیسی به همین مرتبه از بزرگی قرار داده شده و تا دمایی زیر دمای گذار سرد شد؛ آنگاه میدان حذف شد و شارگیر افتاده در درون نمونه، با مرتعش کردن نمونه بین دو پیچه، که به طور متوالی با پیچش مخالف به هم وصل شده‌اند، اندازه‌گیری شده است. این آزمایش چندین بار تکرار شد و شارگیر افتاده به صورت تابعی از میدان اعمال شدهٔ اولیه در شکل ۱۰-۱۶ (ب) نشان داده شده است. کوانتش با واحد $h/2e$ به خوبی دیده می‌شود؛ تعداد کوانتومها به گونه‌ای است که میدان‌گیر افتاده، تا آنجا که ممکن است، به میدان اعمال شدهٔ اولیه نزدیک باشد. کوانتومهای بالاتر در شکل ۱۰-۱۶ (ب) کمتر مشخص می‌شوند، زیرا احتمالاً به خاطر درزی است که در جایی در طول لایهٔ قلع وجود دارد، که یک یا چند کوانتوم شار می‌توانند از آن بگذرند.

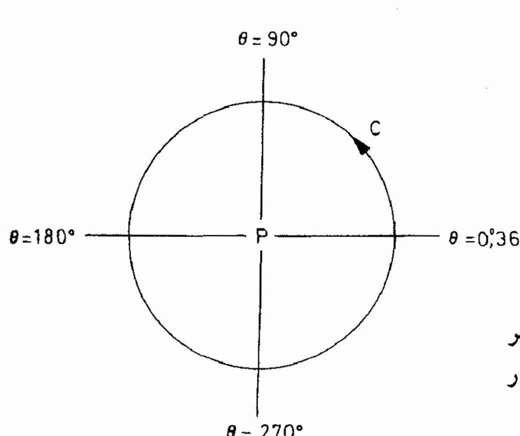
۱- این نتایج با مجوز از مرجع زیر اقتباس شده‌اند:
B.S. Deaver and W.M. Fairbank, Phys. Rev. Lett. 7, 43 (1961).

بزرگی کوانتوم شار گواهی بسیار قوی از وجود زوج شدگی کوپر در ابررساناها در اختیار می‌گذارد. ضریب ۲ در مخرج $h/2e$ از ۲ ای که در جملهٔ دوم واقع در پرانتز معادلهٔ (۱۰-۲۷) هست، و از این رو مستقیماً از باریک زوج کوپر می‌آید. باید به خواننده‌ای که نگران عدم دقت کافی در به دست آوردن کوانتش شار است (مثلاً به خاطر چشم‌پوشی از ساختار داخلی تابع زوج کوپر) این اطمینان را بدهیم که استخراج دقیق تنها مبتنی بر خواص متقارن پارامتر نظم قابل عرضه است.

۱۰-۵-۳ خطوط شار کوانتیده و ابررسانایی نوع ۲

در اینجا به پیامدهایی از کوانتش شار عبوری از منحنی C، که ناحیهٔ کاملاً پر شده از ابررسانا را احاطه کرده است، می‌پردازیم. فرض می‌کنیم که یک کوانتوم شار از C بگذرد به نحوی که فاز θ در پارامتر نظم ابررسانایی، در یک دور کامل منحنی C، به قدر 2π تغییر کند. در آن صورت پر بند با فاز ثابت مطابق شکل ۱۰-۱۷ ظاهر خواهد شد و این مسئله‌ای در نقطهٔ P درون منحنی C، که در آنجا θ باید تمام مقادیر بین ۰ و 2π را اختیار کند، پیش خواهد آورد. چون این امر با دربایست تک مقداری پارامتر منظم سازگار است، عبور شار مغناطیسی کوانتیده از درون ابررسانا منتفی خواهد شد و در نتیجه این امر حاکی از آن است که ابررسانا در حالت مایسنر است.

امکانی دیگر نیز وجود دارد. اگر بگذاریم $|\psi|$ در نقطهٔ P به صفر میل کند، آنگاه پارامتر نظم باز هم در آنجا تک مقدار است (مقدار آن صفر است)؛ فاز پارامتر نظم در نقطه‌ای، که در آن $|\psi| = 0$ است، تعریف نشده است. اگر این استدلال را برای سایر مقاطع از ابررسانا تکرار کنیم، در آن صورت در می‌یابیم که $|\psi|$ باید در طول یک خط پیوسته صفر شود و از این رو به مفهوم خط **شار کوانتیده** خواهیم رسید.



شکل ۱۰-۱۷ : پربند با فاز ثابت پارامتر نظم برای منحنی C، که یک کوانتوم شار مغناطیسی را در برمی‌گیرد.

ساختار چنین خطی در شکل ۱۰-۱۸ نشان داده شده است. چگالی زوجهای کوپر $|\psi|^2$ روی این خط به صفر می‌رسد [شکل ۱۰-۱۸ (الف)]، که بنابراین می‌توان آن را به عنوان رشته‌ای از مادهٔ غیر ابررسانایی تصور کرد. یک جریان چرخان حول این خط وجود دارد [شکل ۱۰-۱۸ (ب)]، که میدان مغناطیسی [شکل ۱۰-۱۸ (ج)] همبسته به شار کوانتیده را تولید می‌کند.

آرایه‌ای از خطوط شار کوانتیده سازوکاری برای نفوذ شار در حالت آمیختهٔ ابررساناهای نوع۲ فراهم می‌کند. (بخش ۱۰-۲-۳)؛ مطالعات با میکروسکوپ الکترونی [1] حاکی از آن است که خطوط شار میل به ساختن یک شبکهٔ مثلثی منظم دارند. در اصل امکان دارد خطوطی وجود داشته باشند که بیش از یک کوانتوم شار را در برداشته باشند، ولی چنین خطوطی انرژی بیشتری دارند و در عمل فقط خطوط تک کوانتیده یافت می‌شوند. از شکل ۱۰-۱۸ می‌بینیم که دو مقیاس طول همبسته به خط شار وجود دارد. با استفاده از بخش ۱۰-۳ انتظار داریم که مقیاس طول برای تغییرات جریان و میدان [شکلهای ۱۰-۱۸ (ب) و (ج)] همان عمق نفوذ λ باشد. می‌توان انتظار داشت که مقیاس طول ξ در تغییرات $|\psi|^2$ ، همبسته به اندازهٔ تابع زوج کوپر باشد [شکل ۱۰-۱۸ (الف)]؛ در واقع چنین هم هست و در یک ابررسانای خالص می‌توان نوشت

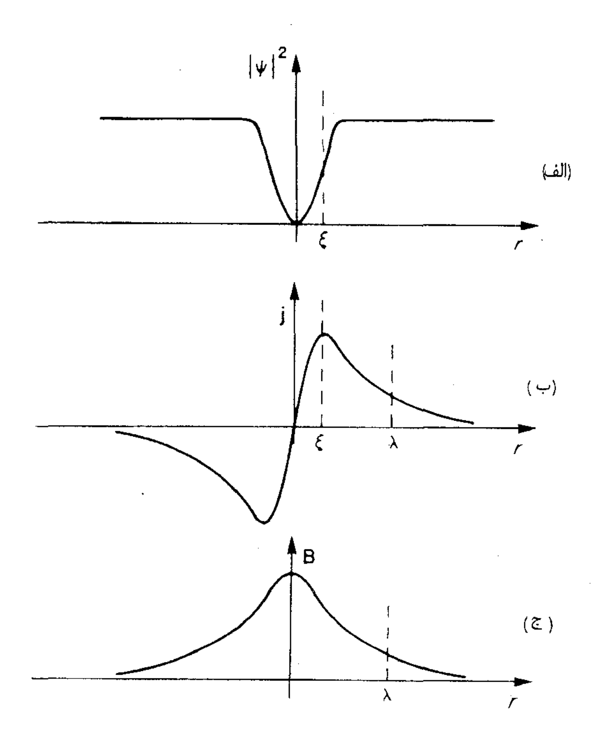
$$\xi \approx \frac{\xi_0}{(1-T/T_c)^{1/2}} \tag{۱۰-۳۱}$$

که در آن ξ_0 طول همدوسی BCS معادلهٔ (۱۰-۱۷) است.

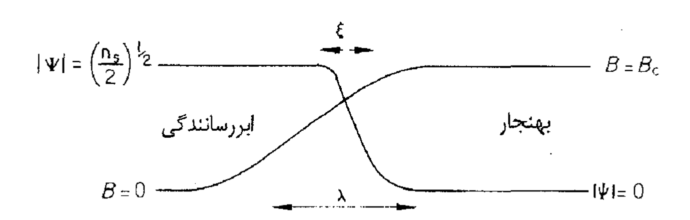
اکنون می‌توانیم به این سؤال به طور کیفی پاسخ دهیم که چرا برخی از ابررساناها نوع ۱ و بقیه نوع ۲ هستند. برای این کار، انرژی صرف شده برای تشکیل مرز تخت بین ناحیهٔ ابررسانا و بهنجار را در ابررسانای نوع ۱؛ مطابق آنچه که در شکل ۱۰-۱۹ نشان داد شده است، برآورد می‌کنیم؛ چون فازهای ابررسانا و بهنجار، برای میدان اعمال شدهٔ B_c ، در تعادل‌اند، انرژی به ازای واحد حجم ناحیه‌های یکنواخت حجیم در دو طرف مرز برابر است. ولی در خود ناحیهٔ مرزی اتلافی در انرژی چگالش در فاصلهٔ ξ از مرز وجود دارد، که موجب می‌شود انرژی آزاد به ازای واحد سطح ***افزایش*** یابد:

$$\Delta G_c \approx (G_N - G_S)\,\xi \tag{۱۰-۳۲}$$

۱- برای مثال مرجع زیر را ببینید :
U.Essman and H.Trauble, Scientific American, **224,** *(March), 74 (1971).*



شکل ۱۰-۱۸: تغییرات $|\psi|^2$ ، j و B در یک خط شار کوانتیده.



شکل ۱۰-۱۹: مرز بین ناحیهٔ بهنجار و ابررسانا در یک ابررسانای نوع ۱. این مرز فقط به ازای میدان اعمال شدهٔ برابر B_c می‌تواند در تعادل باشد. پارامتر نظم در فاصله‌ای از مرتبهٔ ξ کاهش می‌یابد و میدان تا فاصله‌ای از مرتبهٔ λ در درون ناحیهٔ ابررسانا نفوذ می‌کند.

که در آن $G_N - G_S$ انرژی چگالش به ازای واحد حجم است. وجود مرز امکان می‌دهد که میدان B_c تا فاصله‌ای از مرتبهٔ λ به درون ناحیهٔ ابررسانا نفوذ کند و به ***کاهشی*** در انرژی آزاد به ازای واحد سطح به قرار زیر منجر شود:

$$\Delta G_B \approx -\frac{1}{2\mu_0} B_c^2 \lambda \qquad (۱۰-۳۳)$$

مطابق انتظار، فقط در صورتی رفتار ابررسانای نوع ۱ داریم که انرژی همبسته با تشکیل مرز، $\Delta G_c + \Delta G_B$ ، مثبت باشد. با توجه به معادلهٔ (۱۰-۶)، $(G_N - G_S)$ و $B_c^2 / 2\mu_0$ برابراند، در نتیجه شرط داشتن رفتار نوع ۱ ابرسانایی تقریباً $\lambda < \xi$ است. وقتی $\lambda > \xi$، برای ابررسانای واقع در میدان اعمال شدهٔ از مرتبهٔ B_c، از نظر انرژی مطلوبتر آن است که ابررسانا به آمیزه‌ای از ناحیه‌های بهنجار و ابررسانا تبدیل شود؛ کاهش انرژی مربوط به نفوذ میدان به درون نواحی ابررسانا بیش از اتلاف انرژی چگالش است. ترتیب ناحیه‌های بهنجار و ابررسانندهٔ با کمترین انرژی، به صورت شبکه‌ای از خطوط شار کوانتیده است؛ بنابراین اگر $\lambda > \xi$ باشد، انتظار می‌رود رفتار از نوع ۲ باشد. وقتی مسافت آزاد میانگین الکترونها کاهش می‌یابد، λ افزایش و ξ کاهش می‌یابد و این امر تغییر در رفتار از نوع ۱ به ۲ را، که با آلیاژ سازی در بسیاری از فلزات روی می‌دهد، توجیه می‌کند.

وجود ابررسانایی تا میدانهای از مرتبهٔ $40T$ در برخی از آلیاژها و ترکیبات نوع ۲ (شکل ۱۰-۸) کاربری این مواد را در ساختن سیملوله‌های مولد میدانهای مغناطیسی بزرگ توضیح می‌دهد. مسئلهٔ عمده، یافتن موادی است که بتوانند جریان بزرگ بدون اتلافی را در حضور میدانهای بالا حمل کنند. برای بیان این مسئله، سیملوله‌ای را در نظر می‌گیریم که دو انتهایش به هم وصل شده‌اند تا یک مدار ابررسانای پیوسته بسازند؛ میدان به وسیلهٔ جریان بزرگ ماندگاری، که از این مدار می‌گذرد، ایجاد می‌شود. در ابررساناهای نوع ۲، متأسفانه یک چنین میدانی می‌تواند در اثر عبور خطوط شار کوانتیده از پیچه‌های سیملوله و خارج از پیچه کم شود و این هم ارز آن است که پیچه یک مقاومت الکتریکی متناهی داشته باشد. برای جلوگیری از کوچ آزاد خطوط شار به سازوکارهایی نیاز است. این کار معمولاً با ناهمگن کردن ماده، یا وسیلهٔ رسوب دادن و یا سخت گردانی کاری، انجام می‌شود؛ به این وسیله ناحیه‌هایی ایجاد می‌شوند که در آنجا انرژی خط شار کم است و این نواحی به عنوان **مراکز میخکوبی** برای خطوط شار عمل می‌کنند. چنین موادی به وسیلهٔ منحنیهای مغناطش قویاً برگشت‌ناپذیر مشخص می‌شوند. B_{C_2} ی ابررساناهای گرم حتی از B_{c_2} برای موادی که در شکل ۱۰-۸ نشان داده شده‌اند نیز بزرگتر است، ولی مسئلهٔ میخکوبی شار در دمای ازت مایع هنوز در این مواد حل نشده است.

یک مسئله مهم دیگر در سیملوله‌های ابررسانا این امکان است که یک ناحیهٔ کوچک ممکن است به حالت بهنجار، که مقاومت الکتریکی بالایی دارد، برگشت کند. گرمای حاصل، سریعاً باعث می‌شود که تمامی ابررسانا به صورت بهنجار درآید انرژی ذخیره شده در میدان مغناطیسی در حمام هیلیوم مایع همراه با پیامدهای ناگوار، میرا می‌شود. در عمل، سیم ابررسانا ترکیبی از ابررسانا و مس است، به گونه‌ای که اگر ناحیه‌ای کوچک بهنجار شود، مس جریان را با اتلافی اندک حمل می‌کند، و به این وسیله مانع رشد سریع ناحیهٔ بهنجار می‌شود.

۱۰-۵-۴ اثرهای جوزفسون

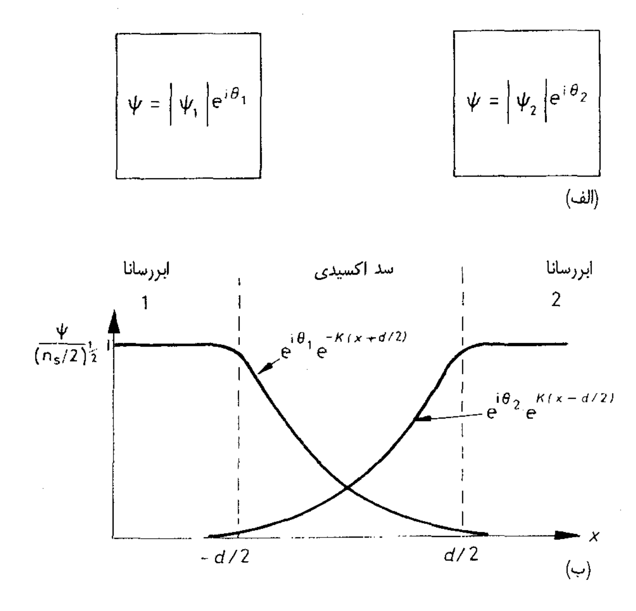
اثرهای جوزفسون احتمالاً برجسته‌ترین تجلی پدیده‌های کوانتومی ماکروسکوپی هستند. این اثرها وقتی روی می‌دهند که دو ناحیهٔ ابررسانای ماکروسکوپی **به طور ضعیف جفت شوند.** برای اینکه توضیح دهیم این جفتیدگی به چه معناست، ابتدا، مطابق شکل ۱۰-۲۰ (الف)، دو نمونهٔ منزوی از یک ابررسانا، با پارامترهای نظم، $|\psi_1| exp(i\theta_1)$ و $|\psi_2| exp(i\theta_2)$، که از نظر فضایی ثابت هستند، در نظر می‌گیریم. اگر دمای هر دو نمونه یکی باشد، در آن صورت می‌توان نوشت

$$|\psi_1|^2 = |\psi_2|^2 = n_s/2$$

ولی فازهای θ_1 و θ_2ی این دو نمونه در حالت کلی و در غیاب برهم‌کنش بین دو نمونه مختلف هستند؛ همهٔ آنچه که مورد نیاز است آن است که فاز باید به طور فضایی در هر ناحیه، متناظر با ساکن بودن زوجهای کوپر، ثابت باشد. جفتیدگی قوی دو نمونه، که با در تماس با یکدیگر قراردادن آن دو در مساحت گسترده‌ای صورت می‌گیرد، موجب می‌شود دو فاز برابر شوند، $\theta_1 = \theta_2$، به گونه‌ای که تمامی زوجهای کوپر بتوانند در یک حالت باشند؛ در آن صورت، بسیار مشکل بتوان این برابری را به هم زد. اگر جفتیدگی ضعیف باشد، حالت با کمترین انرژی بازهم حالت با $\theta_1 = \theta_2$ است، ولی با عبور دادن جریان اندکی از پیوندگاه یا با اعمال ولتاژ کمی در دو سر آن، امکان ایجاد اختلاف فاز بین دو ناحیه وجود دارد. گفته می‌شود که این دو ابررسانا، که با مفهوم یاد شده به طور ضعیف جفت شده‌اند، یک **پیوندگاه جوزفسون** می‌سازند و جفتیدگی بین آنها به عنوان یک **اتصال ضعیف** وصف می‌شود.

برای دستیابی به جفتیدگی ضعیف بیش از یک راه وجود دارد، ولی بحث خود را به دو ابررسانا، که مطابق شکل ۱۰-۲۰ (ب) به وسیلهٔ مانعی اکسیدی به ضخامت چند اتم از هم جدا هستند، محدود می‌کنیم. جفتیدگی از آنجا ناشی می شود که الکترونها می‌توانند، در اثر فرآیند تونل زنی مکانیک کوانتومی، از سد عبور کنند. وقتی فلز به حالت بهنجار خود است، جریان تونل زنی، که از سد عبور می‌کند، با ولتاژ دو سر پیوندگاه متناسب است؛ چنین رفتاری را **اهمی** وصف می‌کنند و مقاومت نوعی پیوندگاه 1Ω است.

در دمایی کمتر از T_c این امکان وجود دارد که زوجهای کوپر در سد اکسیدی تونل بزنند؛ جریان خالصی می تواند در غیاب اختلاف پتانسیل اعمال شده وجود داشته باشد و این متناظر است با یک ابر جریان بدون اتلاف که حال به محاسبهٔ آن خواهیم پرداخت. به دلیل تونل زنی زوجها، پارامتر نظم ابررسانایی در سرتاسر سدّ اکسیدی گسترش دارد؛ پارامتر نظم در داخل این سد را به منزلهٔ مجموع سهمهای نشان داده شده در شکل ۱۰-۲۰ (ب) در نظر می‌گیریم: یک سهم در ناحیهٔ ۱ به وجود می‌آید و در درون سدّ به طور نمایی کاهش می‌یابد و منشاء سهم دیگر در ناحیهٔ ۲ است که آن هم به طور نمایی داخل سدّ کم می‌شود. فرض می‌کنیم که سهم ناشی از ناحیهٔ ۱ به هنگام رسیدن به ناحیهٔ ۲



شکل ۱۰-۲۰: (الف) دو نمونهٔ منزوی از یک ابررسانا. (ب) سهمهای پارامتر نظم ابررسانایی در داخل سد اکسیدی همبسته به تونل زنی زوجهای کوپر از آن سد.

بسیار کوچک باشد و برعکس، به نحوی که بتوانیم برای پارامتر نظم در داخل ناحیهٔ ابررسانانده همان مقدار حجمی‌اش را تا لبهٔ سد در نظر بگیریم. بنابراین پارامتر نظم را در درون سد به صورت زیر می‌نویسیم:

$$\psi = (n_S/۲)^{۱/۲}\,[e^{i\theta_۱ - K(x+d/۲)} + e^{(i\theta_۲ + K(x-d/۲))}] \qquad (۱۰\text{-}۳۴)$$

که در آن سد از $x = -d/۲$ تا $x = +d/۲$ گسترش دارد و $K^{-۱}$ طول مشخصهٔ کاهش پارامتر نظم درون سد است. $\theta_۱$ و $\theta_۲$ فازهای پارامتر نظم در دو سوی پیوندگاه هستند. برای محاسبهٔ چگالی جریان زوج عبوری از سد، معادلهٔ (۱۰-۲۵) با $\mathbf{A} = ۰$ و معادلهٔ (۱۰-۳۴) برای پارامتر نظم را به‌کار می‌بریم تا به دست آوریم

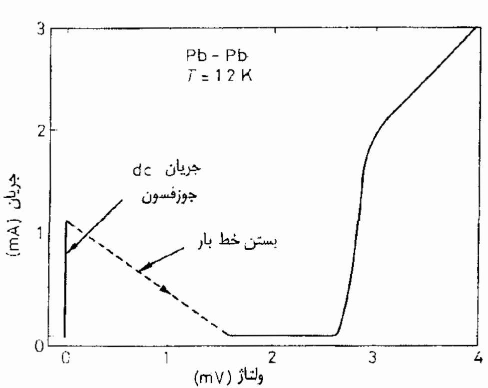
$$j = \frac{ie\hbar n_s}{۲m}\, K e^{-Kd}\,(-e^{i(\theta_۱-\theta_۲)} + e^{i(\theta_۲-\theta_۱)}) = J_۰ \sin\delta \qquad (۱۰\text{-}۳۵)$$

که در آن $\delta = \theta_۱ - \theta_۲$ اختلاف فاز بین دو طرف پیوندگاه و $J_۰ = \frac{e\hbar n_s}{m} K\exp(-Kd)$ است.

اگر جریانی از پیوندگاه عبور کند، اختلاف فاز خود را به نحوی تنظیم می‌کند که **معادلهٔ جوزفسون** (۱۰-۳۵) برقرار باشد. وجود شارش بدون اتلاف انرژی زوجهای کوپر از یک اتصال ضعیف اثر dc **جوزفسون** نام دارد و تأیید تجربی این اثر در شکل ۱۰-۲۱ دیده می‌شود. چگالی جریان بیشینه در سد اکسیدی $J_\circ$ است و در اختلاف فاز δ برابر $\frac{\pi}{۲}$ روی می‌دهد. آنچه که وقتی جریان از این مقدار بیشتر می‌شود رخ می‌دهد بستگی به خط باری مداری دارد که برای تأمین این جریان به کار برده شده است؛ رفتار مدار به کار رفته برای رسیدن به نتایج شکل ۱۰-۲۱ در همان شکل نشان داده شده است.

جریانی که برای ولتاژهای متناهی در شکل ۱۰-۲۱ مشاهده می‌شود، به تونل زنی الکترونهای بهنجار در سد اکسید مربوط می‌شود. تونل زنی یک الکترون بهنجار، در دماهای پایین که تمامی الکترونهای دو طرف سد زوج هستند، مستلزم شکسته شدن یک زوج است. این عمل فقط در صورتی انجام می‌شود که الکترون تونل‌زننده در سد، انرژی‌ای به قدر ۲Δ از اختلاف ولتاژ دو سر سد کسب کند. بنابراین جریان، تا رسیدن به ولتاژ $۲\Delta(T)/e$ اندک است. افزایش جریان در این شرایط در شکل ۱۰-۲۱ واضح است و تونل‌زنی الکترون بهنجار روشی دقیق و مستقیم برای اندازه‌گیری $\Delta(T)$ فراهم می‌کند؛ اندازه‌گیریهای مربوط به شکل ۱۰-۱۱ با همین روش انجام شده‌اند. رابطهٔ جریان- ولتاژ، برای ولتاژهای بالاتر از $۲\Delta(T)/e$، به مشخصهٔ رفتار اهمی حالت بهنجار تبدیل می‌شود.

تونل‌زنی زوج کوپر در ولتاژهای متناهی چگونه خواهد بود؟ برای پاسخ گفتن به این سؤال باید وابستگی زمانی پارامتر نظم ابررسانایی را بررسی کنیم. چون پارامتر نظم مثل تابع موج



شکل ۱۰-۲۱: مشخصهٔ جریان - ولتاژ پیوندگاه تونلی Pb - Pbo - Pb در دمای $۱/۲K$. قلهٔ جریان در $V=\circ$ اثر dc ی جوزفسون است. نتایج این شکل با مجوز از مرجع زیر اقتباس شده‌اند:

D.N. Langenbury et al., Proc. IEEE ***54****, 560 (1966) . © 1966 IEEE.*

زوج کوپر عمل می‌کند، انتظار داریم که این وابستگی به قرار زیر باشد:

$$\psi \propto e^{-i\mu t/\hbar}$$

که در آن μ انرژی یک زوج است؛ روشن خواهد شد که انرژی مربوطه همان پتانسیل شیمیایی زوج است. به طول عامتر، اگر μ به زمان بستگی داشته باشد، داریم

$$\psi \propto e^{i\theta(t)}$$

که در آن

$$\hbar\, \partial\theta/\partial t = -\mu \qquad (۳۶\text{-}۱۰)$$

معمولاً، به دلیل اینکه یک ابررسانا نمی‌تواند اختلاف پتانسیل را تحمل کند، μ یکنواخت است و معادلهٔ (۱۰-۳۶) هیچ پیامد قابل مشاهده‌ای ندارد. ولی برقرار کردن اختلاف پتانسیل V بین دو ابررسانا، که به طور ضعیف جفت شده‌اند. امکانپذیر است، که در آن حالت از معادلهٔ (۱۰-۳۶) داریم

$$\hbar\frac{\partial\theta_۱}{\partial t} - \hbar\frac{\partial\theta_۲}{\partial t} = -\mu_۱ + \mu_۲ = ۲eV$$

یا

$$\hbar\frac{\partial\delta}{\partial t} = ۲eV \qquad (۳۷\text{-}۱۰)$$

که در آن δ، مثل معادلهٔ (۱۰-۳۵)، اختلاف فاز دو سر پیوندگاه است.

اگر V ثابت باشد، از معادلهٔ (۱۰-۳۷) انتگرال می‌گیریم تا به دست آوریم

$$\delta = \frac{۲eV}{\hbar}t + \delta_۰ \qquad (۳۸\text{-}۱۰)$$

که در آن $\delta_۰$ مقدار δ در $t = ۰$ است. از این رو اختلاف فاز به طور خطی با زمان زیاد می‌شود و با درج این مقدار در معادلهٔ (۱۰-۳۵)، جریان چنین خواهد شد:

$$j = j_۰ \sin\left(\frac{۲eV}{\hbar}t + \delta_۰\right) \qquad (۳۹\text{-}۱۰)$$

بنابراین، در اختلاف پتانسیلهای متناهی یک ابر جریان ac از زوجهای کوپر، با بسامد $\nu = \omega/۲\pi = ۲eV/h$، وجود دارد و این به اثر acی جوزفسون معروف است؛ چون جریان متناوب است، در مشخصهٔ جریان ولتاژ dc مربوط به شکل ۱۰-۲۱ دیده نمی‌شود. نسبت ولتاژ به بسامد برابر است با $h/۲e =$ کوانتوم شار $= ۲/۰۷ \times ۱۰^{-۱۵}\, V\, Hz^{-۱}$، و اثر acی جوزفسون روشی بسیار دقیق برای اندازه‌گیری نسبت ثابتهای بنیادی در اختیار می‌گذارد.

یک طریق برای مشاهدهٔ اثر acی جوزفسون تاباندن امواج میکرونی با بسامد ω بر پیوندگاه

و همزمان با آن اعمال پتانسیل dc برابر $V_\circ$ بر آن است. در آن صورت اختلاف پتانسیل کل برابر $V_\circ + v \cos(\omega t)$ است و انتگرالگیری از معادلهٔ (۱۰-۳۷) چنین نتیجه می‌دهد

$$\delta = \frac{۲e}{\hbar} \left(V_\circ t + \frac{v}{\omega} \sin \omega t\right) + \delta_\circ$$

با استفاده از معادلهٔ (۱۰-۳۵)، جریان زوج حاصل، که از پیوندگاه می‌گذرد، عبارت است از

$$j = j_\circ \sin \left[\frac{۲e}{\hbar} \left(V_\circ t + \frac{v}{\omega} \sin(\omega t)\right) + \delta_\circ\right]$$

که یک جریان مدولهٔ بسامد است که مؤلفه‌هایی در بسامدهای $(۲e/\hbar)V_\circ \pm n\omega$ دارد که در آن n عددی است درست: بنابراین، اگر داشته باشیم

$$V_\circ = \frac{n\hbar\omega}{۲e} \qquad (۱۰-۴۰)$$

یک جریان dc (با بسامد صفر) خواهیم داشت. شکل ۱۰-۲۲ مشخصهٔ جریان - ولتاژ پیوندگاه جوزفسونی را نشان می‌دهد که تحت تابش موج میکرونی قرار گرفته است. این نتیجه پله‌های خوش تعریفی در ولتاژهایی، که به وسیلهٔ معادلهٔ (۱۰-۴۰) پیش بینی می‌شوند، نشان می‌دهد. این تندی شیب پله‌ها است که ما را قادر می‌سازد $h/۲e$ را با دقت تعیین کنیم.[۱]

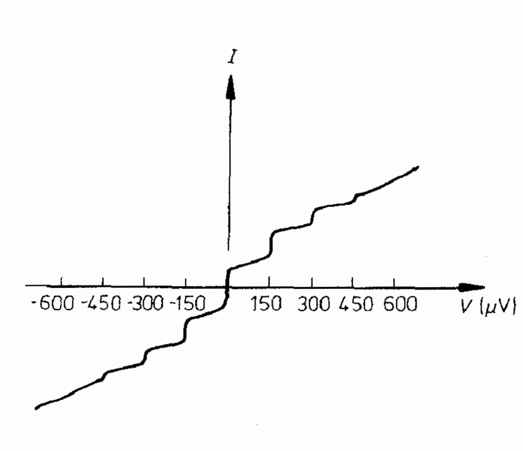
* ۱۰-۵-۵ تداخل کوانتومی

مطابق شکل ۱۰-۲۳ (الف) حلقه‌ای از ابررسانا در نظر بگیرید که شامل دو پیوندگاه جوزفسون، به نامهای a و b است. جریان I، که به طور موازی از این پیوندگاه‌ها می‌گذرد، با توجه به معادلهٔ (۱۰-۳۵)، به قرار زیر است.

$$I = Aj_\circ \sin \delta_a + Aj_\circ \sin \delta_b = ۲Aj_\circ \cos\left(\frac{\delta_a - \delta_b}{۲}\right) \sin\left(\frac{\delta_a + \delta_b}{۲}\right) \qquad (۱۰-۴۱)$$

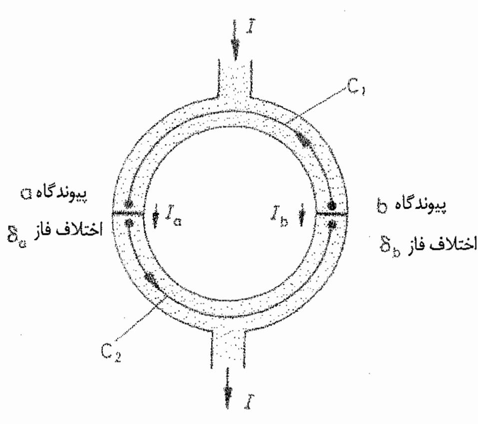
که در آن δ_a و δ_b، به ترتیب، اختلاف فاز دو سر پیوندگاه‌های a و b هستند و A مساحت سطح

۱- مکان پله‌ها را با چنان دقت زیادی می‌توان تعیین کرد که دقت اندازه‌گیری‌های $h/۲e$ با دقتی، که با آن منبع‌های استاندارد ولتاژ مدرج شده‌اند، محدود می‌شود. این امر منجر به استفاده از پیوندگاه جوزفسون به عنوان وسیله‌ای برای تثبیت ولتاژ استاندارد توسط مقدار تعریف $h/۲e$ می‌شود؛ البته این مقدار تعریف شده، با آشناترین مقدار این نسبت سازگار است. مرجع زیر را ملاحظه کنید:
W.H. Parker, et al., Phys. Rev. **177**, *639 (1969)*.

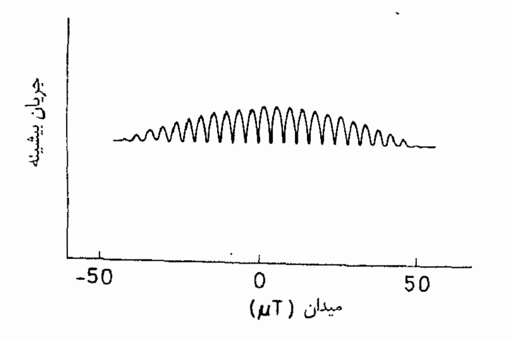


شکل ۱۰-۲۲: پله‌های القا شده در رابطهٔ جریان - ولتاژ مربوط بـه یک پـیوندگاه تماس نقطه‌ای جوزفسون، که تحت تابش موج میکرونی با بسـامد ۷۲ GHz قـرار دارد. ایـن پـیوندگاه در اثـر تـماس بـین قطعه‌ای نوک تیز از نیوبیوم با یک سطح تخت نیوبیوم تشکـیل شـده است. ایـن نتایج با مـجوز از مـرجـع زیـر اقـتباس شده‌اند:

C.C. Grimes and S.Shapiro, Phys. Rev. **169**, *397 (1968).*



(الف) جریانی که به طـور مـوازی از دو پیوندگاه جوزفسون، a و b، می‌گذرد.



(ب) جــریان بـیشینه‌ای کـه بـه وسـیلهٔ پیوندگاهها عبور داده می‌شود به صورت تابعی از میدان مغناطیسی اعـمال شـده. دامنهٔ تغییرات در مـیدانـهای بـالا نـزول مـی‌کند، زیـرا مـیدان سبب مـی‌شود اختلاف فاز داخل هر یک از پیوندگاه‌ها با مکان تغییر کند.[۱]

شکل ۱۰-۲۳

۱- نتایج از مرجع زیر با مجوز اقتباس شده‌اند:
R.C. Jaklevic et al., Phys. Rev. **140**, *A 1628 (1965).*

هر یک از پیوندگاههاست. حال نشان می‌دهیم که $\delta_b - \delta_a$، به وسیلهٔ شار مغناطیسی گذرنده از حلقه تعیین می‌شود. از همان رهیافتی استفاده می‌کنیم که برای اثبات کوانتش شار در بخش ۱۰-۵-۲ به کار رفت. به این دلیل که چگالی جریان در امتداد منحنی‌های C_1 و C_2 واقع در ناحیه‌های ابررسانایی حجیم صفر می‌شود، معادلهٔ (۱۰-۲۸) معتبر است و با انتگرالگیری از آن روی این منحنی‌ها خواهیم داشت

$$\theta_{a_1} - \theta_{b_1} = \frac{2e}{\hbar} \int_{C_1} \mathbf{A} \cdot \mathbf{dl} \quad \text{و} \quad \theta_{b_2} - \theta_{a_2} = \frac{2e}{\hbar} \int_{C_2} \mathbf{A} \cdot \mathbf{dl}$$

که در آن θ_{a_1}، θ_{b_1}، θ_{a_2} و θ_{b_2} فازها در انتهاهای منحنیهای C_1 و C_2 در نقاط مجاور پیوندگاهها هستند، که با شاخصها متمایز شده‌اند. با جمع کردن این معادلات، داریم

$$\delta_a - \delta_b = \frac{2e}{\hbar} \oint_c \mathbf{A} \cdot \mathbf{dl} = \frac{2e}{\hbar} \Phi \qquad (۱۰\text{-}۴۲)$$

که در آن Φ شار گذرنده از حلقه است و $\delta_a = \theta_{a_1} - \theta_{a_2}$ و $\delta_b = \theta_{b_1} - \theta_{b_2}$ اختلاف فازها در دو سر پیوندگاهها هستند. برای به دست آوردن انتگرال $\mathbf{A}$ روی یک منحنی بسته لاجرم سهمهای کوچک خود پیوندگاهها را به آن افزوده‌ایم؛ این خطای قابل اغماضی وارد مسئله می‌کند، زیرا $\mathbf{A}$ در سرتاسر ناحیهٔ بسیار باریک پیوندگاه تغییراتی هموار دارد.

با درج معادلهٔ (۱۰-۴۲) در معادلهٔ (۱۰-۴۱) داریم

$$I = 2Aj_0 \cos\left(\frac{e}{\hbar} \Phi\right) \sin\left(\frac{\delta_a + \delta_b}{2}\right) \qquad (۱۰\text{-}۴۳)$$

این شبیه ابر جریانی است [معادلهٔ (۱۰-۳۵)] که از تک پیوندگاه می‌گذرد؛ در مورد پیوندگاه دوتایه این $(\delta_a + \delta_b)/2$ است که تغییر می‌کند تا با جریان I ای که حلقه را تغذیه می‌کند جور باشد. ابر جریان بیشینه‌ای که پیوندگاه در این وضعیت حمل می‌کند عبارت است از

$$I_{max} = 2AJ_0 \left| \cos\left(\frac{e}{\hbar} \Phi\right) \right| \qquad (۱۰\text{-}۴۴)$$

که تغییرات دوره‌ای نسبت به Φ دارد؛ دوره همان کوانتوم شار $h/2e$ است. تغییر اندازه‌گیری شدهٔ ابر جریان بیشینه در یک پیوندگاه دو تایه را می‌توان در شکل ۱۰-۲۳ (ب) دید. اگر دو پیوندگاه یکسان نباشند، در آن صورت جریان بیشینه نسبت به Φ تغییراتی دوره‌ای دارد، ولی، برخلاف آنچه معادلهٔ (۱۰-۴۴) پیشگویی می‌کند، به صفر نمی‌رسد.

این اثر را، به دلیل شباهتش با آزمایش تداخل شکافهای یانگ در اپتیک (صفحهٔ ۱۲۷ کتاب اسمیت و تامسون [۵])، **تداخل کوانتومی** می‌نامیم. اختلاف $\delta_a - \delta_b$ شبیه اختلاف فاز بین پرتوهای نور از شکافها تا پرده‌ای است که نقش تداخل بر آن مشاهده می‌شود؛ از این رو معادلهٔ (۱۰-۴۴) متناظر با وابستگی کسینوسی دامنهٔ نور با مکان روی پرده‌ای است. آزمایشهایی با تداخل سنجهای ابررسانا با استفاده از پیوندگاههایی، به فاصلهٔ از مرتبهٔ $1cm$ از هم انجام شده‌اند؛ نتایج این آزمایشها گواه محکمی است بر اینکه پارامتر ابررسانایی در فواصل کاملاً ماکروسکوپی همدوس فازی است.

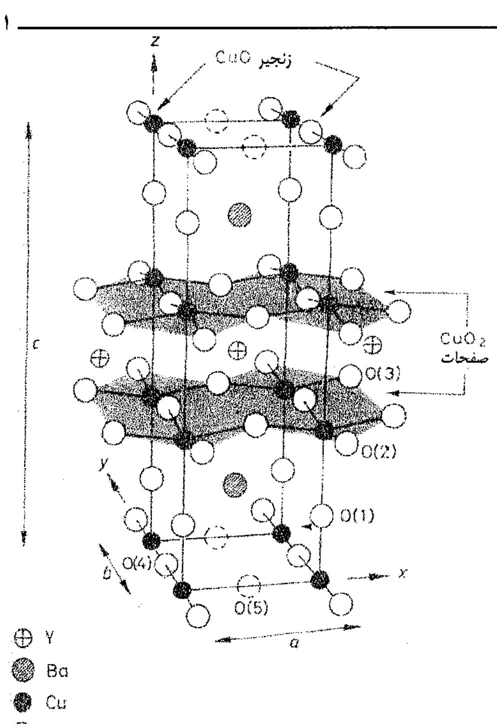
به دلیل کوچکی کوانتوم شار، یک زوج از پیوندگاهها، نظیر شکل ۱۰-۲۳ (الف)، با مساحت $1cm^2$ جریان بحرانی را، برای یک تغییر کوچک میدان فقط برابر $10^{-11}T$، از بیشینه به کمینه تغییر می‌دهد. ***اسکوییِد*** dc [1] (دستگاه تداخل کوانتومی ابررسانایی) ابزاری است که با بهره‌برداری از این هندسه میدانهای مغناطیس بسیار کوچک را با دقتی زیاد اندازه می‌گیرد.

۱۰-۶ ابررساناهای گرم

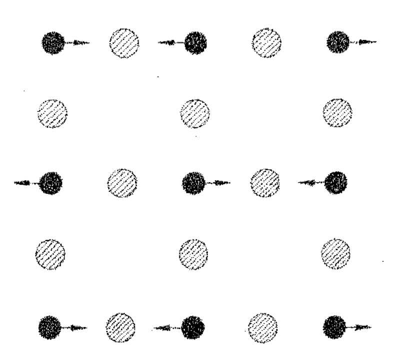
ابررساناهای با T_c ی بالا همگی اکسید هستند و خصلتهای مشترک بسیار دیگری نیز دارند. از $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$، که به طور گسترده مطالعه شده است، استفاده می‌کنیم تا رفتار این ابررساناها را نمایش دهیم؛ این ماده دارای $T_c = 92K$ است و به دلیل تعداد نسبی اتمهای فلزی موجود در فرمول شیمیایی آن، به آن ابرسانای ۱-۲-۳ اتلاق می‌شود. به جای ایتریوم می‌توان اتمهای سه ظرفیتی گوناگون دیگری (مثل هولمیوم و نئودیمیوم) را، بدون آنکه اثر قابل ملاحظه‌ای در خواص ابررسانایی آلیاژ ایجاد شود، قرارداد. ساختار بلورین $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ در شکل ۱۰-۲۴ (الف) نشان داده شده است. همان گونه که نشان داده شده است، این ساختار شامل صفحاتی از اتمهای Cu و O، با فرمول شیمیایی CuO_2 است؛ همهٔ ابررساناهای با T_c بالاتر از $50K$، که تا سال ۱۹۹۰ میلادی (۱۳۶۹ هجری شمسی) کشف شده‌اند دارای صفحات CuO_2 (یا NiO_2) مشابه این صفحات هستند و اعتقاد بر آن است که این صفحات نقشی کلیدی در رسانایی و ابررسانایی ابررساناهای گرم ایفا می‌کنند. همان طور که در شکل ۱۰-۲۴ (الف) مشخص شده است، $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ زنجیره‌هایی از اتمهای یک در میان Cu و O نیز دارد.

مقاومت ویژهٔ الکتریکی حالت بهنجار $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ بسیار ناهمسانگرد است و برای جریان الکتریکی گذرنده در راستای محور z به مراتب بزرگتر از جریان الکتریکی گذرنده در

۱- *Superconducting Quantum Inerference Device*



(الف) ساختاربلوری $YBa_۲Cu_۳O_{۷-\delta}$. یاختهٔ یکه همان است که نشان داده شده است. پنج جایگاه مختلف اکسیژن مشخص شده‌اند؛ برای $\delta \approx ۰/۱$، جایگاههای $O(۴)$ تقریباً پر و جایگاههای $O(۵)$ تهی هستند.



(ب) نقشهٔ صفحهٔ $CuO_۲$، که نظم پادفرومغناطیسی اسپینهای Cu را که برای δ بزرگتر از حدود ۰/۶ روی می‌دهد، نشان می‌دهد.

شکل ۱۰-۲۴

صفحه xy است. این امر قاعدتاً گواهی است بر اینکه رسانش عمدتاً به خاطر حرکت حاملها در صفحات $CuO_۲$ است. بحث پیرامون رفتار $YBa_۲Cu_۳O_{۷-\delta}$ را اغلب، با تلقی کردن هر یک از

صفحات CuO_2 به منزلهٔ یک دستگاه دو بعدی منزوی، ساده می‌کنند. وقتی این کار را می‌کنیم، لازم است خواننده به خاطر داشته باشد که این یک فرا ساده‌سازی خام است؛ درک کامل خواص $YBa_2\,Cu_3\,O_{7-\delta}$ را فقط می‌توان با در نظر گرفتن ساختار پیچیدهٔ سه بعدی آن به دست آورد.

بررسی آثار ناشی از تغییر اکسیژن موجود در $YBa_2\,Cu_3O_{7-\delta}$ آموزنده است. کار را با $YBa_2\,Cu_3\,O_6$، که در آن ۱ $=\delta$ است، آغاز می‌کنیم. در این ماده، اتمهای اکسیژن مربوط به زنجیره CuO شکل ۱۰-۲۴ (الف) کاملاً غایب‌اند. در این صورت، چون چیزی برای متمایز کردن جهت x از y وجود ندارد، ساختار چهارگوشی ($\alpha=\beta=\gamma=90°$ و $a=b\neq c$) است. $YBa_2\,Cu_3O_6$ یک عایق الکتریکی است؛ صفحه CuO_2، در این ماده، را می‌توان تقریباً ساخته شده از یونهای Cu^{2+} و O^{2-} در نظر گرفت. یونهای Cu^{2+} نه الکترون $3d$، با اسپین کامل $S=\frac{1}{2}$ در پوستهٔ خارجی خود دارند[1]. همان گونه که درشکل ۱۰-۲۴ (ب) نشان داده شده است، اسپینهای Cu نظم پادفرومغناطیسی دارند و دمای نیل آنها اندکی بیش از $400K$ است. یونهای O^{2-} دارای پوستهٔ خارجی $2p$ ی پر هستند و بنابراین خواص مغناطیسی ندارند.

وقتی اکسیژن به $YBa_2Cu_3O_6$ اضافه شود، اتمهای اضافی نخست جایگاههایی را، که روی شکل ۱۰-۲۴ (الف) با $O(4)$ و $O(5)$ مشخص شده‌اند، به طور کتره‌ای، اشغال می‌کنند؛ بنابراین ساختار، چهارگوشی باقی می‌ماند. اتمهای اضافه شدهٔ اکسیژن مانند ناخالصی‌های پذیرنده در نیمرسانا (بخش ۵-۳) عمل می‌کنند و بنابراین حفره‌هایی به بلور می‌افزایند. برخی از این حفره‌ها روی صفحات CuO_2 قرار می‌گیرند، ولی وقتی غلظت کم باشد، رسانشی وجود ندارد؛ $YBa_2\,Cu_3\,O_{7-\delta}$، تا کاهش δ به حدود ۰/۶، عایق پادفرومغناطیس باقی می‌ماند. این مطلب را، با پذیرش اینکه حفره‌ها روی اتمهای اکسیژن موجود در صفحات CuO_2 جایگزیده هستند، می‌توان فهمید. یک اتم اکسیژن همراه با یک حفره، پوسته خارجی شامل پنج الکترون $2p$ و لذا $S=\frac{1}{2}$ دارد. جایگزیدگی حفره‌ها نشانی است از اینکه برهم کنشهای الکترون -الکترون در لایه‌های CuO_2 از اهمیت برخوردارند (بخشهای ۴-۳-۲ و ۱۳-۵-۶ را ببینید).

وقتی اکسیژن اضافی متناظر با تقلیل δ و رسیدن آن به حدود ۰/۶ می‌شود، دو تغییر مهم پیش می‌آید: تقارن ساختار بلور از چهارگوش به راستگوش ($a\neq b\neq c$, $\alpha=\beta=\gamma=90°$) تغییر می‌کند و گذار عایق - فلز روی می‌دهد (بخش ۱۳-۵-۶). قلمروی، که این تغییرات به آن مربوط می‌شوند، هنوز شناخته شده نیست. تغییر در ساختار بلور به واسطهٔ اشغال مرجح

۱- این امر از قواعد هوند نتیجه می‌شود (بخش ۷-۲-۱) از قرار معلوم اندازه حرکت زاویه‌ای مداری یون توسط میدان بلور فرو نشانده می‌کند.

جایگاههای $O(4)$ نسبت به جایگاه‌های $O(5)$ صورت می‌گیرد که باعث شکست تقارن x-y و تشکیل زنجیره‌های CuO در شکل ۱۰-۲۴ (الف) می‌شود. نقطهٔ شروع رسانش به خاطر از بین رفتن جایگزیدگی حفره‌هاست؛ معلوم نیست که آیا بهتر است رسانش را ناشی از پرش حفره از یک اتم اکسیژن به اتم اکسیژن دیگر دانست یا آن را در ارتباط با تشکیل نوار انرژی دو بعدی همبسته به هیبریدشدگی (بخش ۴-۳-۴) حالتهای $3d$ ی اتمهای Cu با حالتهای $2p$ ی اتمهای اکسیژن دانست.

برای δ کمتر از ۰/۶ $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ی فلزی گذار به ابررسانایی را در حدود $40K$ متحمل می‌شود، ولی T_c، با کاهش بیشتر δ، زیاد می‌شود تا اینکه برای $\delta=$ ۰/۱ به $92K$ می‌رسد. محقق شده است که امکان ندارد بتوان $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ای تهیه کرد که با ساختار نشان داده شده در شکل ۱۰-۲۴ (الف) مقادیری از δ کوچکتر از حدود ۰/۱ داشته باشد. این ابررسانایی ناشی از زوج‌شدگی کوپری حفره‌ها تفسیر می‌شود؛ اندازه‌گیریهای کوانتوم شار حاکی از آنند که زوج‌شدگی ذراتی با بار به بزرگی $2e$ درگیر مسئله است. برهم کنش مسئول تشکیل زوج هنوز مشخص نشده است؛ انرژی بستگی زوجها نسبتاً بالاتر از آن است که فقط با سازوکار شامل ارتعاشات شبکه، که مسئول زوج شدگی کوپری در ابررساناهای متعارف است، قابل توضیح باشد. نظم پادفرومغناطیسی اتمهای Cu، در گذار عایق- فلز، محو می‌شود، ولی امکان دارد که برهم کنشهای پادفرومغناطیسی بین اسپینهای Cu نقشی در گذار ابررسانایی داشته باشد.

این بحث پیشنهاد می‌کند که ابررسانایی $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ اساساً دو بعدی است. در عمل، این به آن معناست که خواص $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ بسیار ناهمسانگرداند. برای مثال، جریان بحرانی، در مورد شارش جریان در صفحهٔ xy به مراتب بزرگتر از جریان بحرانی مربوط به شارش جریان در راستای z است. این بالا بودن T_c و سرعت فرمی کم مربوط به $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ به آن معناست که طول همدوسی [معادلهٔ (۱۰-۱۷)]، که اندازهٔ تابع موج زوج کوپر را اندازه‌گیری می‌کند، کوچک و قابل مقایسه با اندازهٔ یاختهٔ یکه است. برعکس، چگالی پایین حاملها، از طریق معادلهٔ (۱۰-۱۴) می‌رساند که عمق نفوذ بزرگ است. بنابراین ابررسانهای گرم، از نوع ابررساناهای نوع ۲ ی فرین با مقادیر بسیار بزرگ B_{c2} هستند.

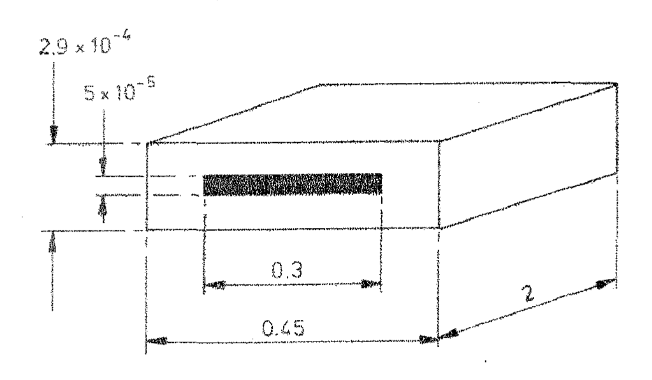
این مواد، به دلیل فوق و به این دلیل که در دمای نیتروژن مایع ($77K$) ابررساناها هستند، کاربردهای بالقوهٔ فراوانی دارند[1]. ولی قبل از اینکه این مواد کاربرد وسیع خود را بیابند، باید بر مسایل مشکلی فائق آمد. بزرگترین مسئله در $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ آن است که این ماده به راحتترین شیوه به عنوان یک سرامیک، یعنی به عنوان تعداد زیادی بلورکهای کوچک متصل به هم تهیه می‌شود. هر چند جریان بحرانی موازی با صفحهٔ xy در هر بلورک بالاست، عملکرد سرامیک، در

۱- مقالهٔ "ابررساناهای نو: چشم انداز کاربردها" با مشخصات زیر را ببینید:
A.M. Wolsky, R.F. Geise and E.J. Daniels, in Scientific American, February 1989.

اثر تماس ضعیف بین بلورکها، نزول می‌کند؛ این نقیصه را می‌توان، با مرتب کردن بلورکها، به نحوی که صفحات xy در بلورکهای همسایه موازی باشند، اصلاح کرد. اگر بنا باشد این مواد جریانهای زیادی را در حضور میدانهای مغناطیسی بالا حمل کنند، برخی روشهای میخکوبی خطوط شار کوانتیده را باید طراحی کرد. این مسئله، در ابررساناهای گرم، که در دمای نیتروژن مایع کار می‌کنند، شدیدتر است، زیرا انرژی گرمایی موجود، خط شار را از مرکز میخکوبی‌اش می‌راند.

مسایل ۱۰

۱-۱۰ جریانی روی دیواره‌های لولهٔ سربی نازک نشان داده شده، در $۴/۲K$ ، القا می‌شود (تمام اندازه‌ها به سانتی‌متر است و مقیاس رعایت نشده است):



در طول ۷ ساعت این جریان به اندازه ۲٪ (حساسیت تجربی) کاهش می‌یابد. حد بالایی‌ای را برای مقاومت ویژهٔ الکتریکی سرب ابررسانا به دست آورید. فرض کنید که عمق نفوذ سرب $۵\times ۱۰^{-۸}m$ است. (این مسئله بر آزمایش انجام شده توسط *Quinn* و *Ittner* مبتنی است؛ مقالهٔ آنها را در *J.Appl. Phys.* **33**, *748 (1962)* ببینید).

۲-۱۰ T_c ی قلع ابررسانا ۳/۷ کلوین و B_c ی آن در دمای $T=۰\ K$ برابر $۳۰/۶\,mT$ است. جریان بحرانی را برای سیمی از جنس قلع به قطر $۱mm$ در دمای $T=۲K$ محاسبه کنید. سیمی از این جنس چه قطری باید داشته باشد تا جریانی برابر $۱۰۰A$ را در حالت ابررسانایی از خود عبور دهد؟

۳-۱۰ شکل تقریبی معادلهٔ (۱۰-۱) را برای B_c به کار برید و وابستگی‌های تقریبی دمایی تفاوت انرژی آزاد، انتروپی و ظرفیت گرمایی بین حالتهای بهنجار و ابررسانا را به دست آورید. ناپیوستگی در ظرفیت گرمایی در گذار ابررسانایی، در غیاب میدان اعمالی، چقدر است؟

۱۰-۴ نشان دهید که مقدار حدی کلوگستون برای B_{c_2} ی یک ابررسانای نوع ۲ با $\mu_B B_{c_2} \approx k_B T_c$ بیان می‌شود.

۱۰-۵ معادلهٔ لندن را به کار برید و نشان دهید که نفوذ یک میدان مغناطیسی موازی به درون لایه‌ای از ابررسانا به ضخامت d واقع در صفحهٔ xy به صورت زیر توصیف می‌شود:

$$B = B_e \cosh(z/\lambda) / \cosh(d/2\lambda)$$

که در آن B_e میدان اعمال شده در وسط لایه در $z=0$ واقع است. میدانی را محاسبه کنید که به ازای آن انرژیهای آزاد گیبس حالتهای بهنجار و ابررسانای این فیلم برابر باشند.

۱۰-۶ اثر غیرموضعی بودن رابطهٔ جریان - میدان بر عمق نفوذ در دمای صفر یک ابررسانای نوع ۱ خالص در حد $\lambda << \xi$ را می‌توان به این صورت برآورد کرد که چون میدان در طولی به مقیاس λ میرا می‌شود ولی وابستگی جریان به متوسط $\mathbf{A}$ در طولی به مقیاس ξ بستگی دارد، مقدار مؤثر $\mathbf{A}$ که باید در معادلهٔ (۱۰-۱۰) درج شود $\lambda \mathbf{A}/\xi$ است. نشان دهید که این رهیافت رابطهٔ زیر را پیشگویی می‌کند

$$\lambda^3 = \lambda_L^2(0)\xi$$

(نتیجه دقیقی که از نظریهٔ BCS استخراج می‌شود عبارت از $\lambda^3 = 0/62\lambda_L^2(0)\xi_0$ است.)

۱۰-۷ درستی مطالب زیر را توجیه کنید:

(الف) در $T = 1K$ قلع تابش الکترومغناطیسی با طول موج $0/9mm$ را قویاً جذب می‌کند در حالی که تابش با طول موج $1/1mm$ را به طور ضعیف جذب می‌کند.

(ب) ابررساناها در دماهای $T \ll T_c$ رساناهای گرمایی ضعیفی هستند.

(ج) میدان بحرانی ابررساناهای مختلف در $T=0$ تقریباً با T_c ***متناسب*** است.

(د) دمای T_c ی ایزوتوپهای متفاوت از یک عنصر به جرم ایزوتوپی بستگی دارد.

۱۰-۸ ابر جریانی، متناظر با پارامتر نظم $(n_s/2)^{1/2} \exp(iqx)$، در لایهٔ نازک به ضخامت $d \ll \lambda$ و واقع در صفحهٔ xy شارش می‌کند. پتانسیل برداری را درون لایه و با پیمانه‌ای که برای آن در وسط لایه $\mathbf{A} = 0$ و $\nabla . \mathbf{A} = 0$ محاسبه کنید. نشان دهید با این پیمانه جملهٔ دوم در معادلهٔ (۱۰-۲۷) با ضریبی تقریباً برابر با $d^2/\lambda_L^2(T)$ از جملهٔ اول کوچکتر است.

۱۰-۹ معادلهٔ (۱۰-۱۰) در حالت کلی معتبر نیست. زیرا سمت چپ آن باید تحت تغییر پیمانه‌ای پتانسیل برداری $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi$ ناوردا باشد، در حالی که سمت چپ آن آشکارا چنین نیست (هر دو مقدار $\mathbf{A}$ یک میدان $\mathbf{B}$ به دست می‌دهند). معادلهٔ ناوردای پیمانه‌ای صحیح همانا معادلهٔ (۱۰-۲۷) است. توضیح دهید چرا پیمانه‌ای که برای آن

معادلهٔ (۱۰-۱۰) برقرار است معادلهٔ $\nabla.\mathbf{A} = 0$ را برآورده می‌کند. از معادلهٔ (۱۰-۲۷) استفاده کنید و تغییر در پارامتر نظم ناشی از تبدیل پیمانه‌ای $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi$ را به دست آورید.

۱۰-۱۰ مطلوب است تعیین :

(الف) انرژی چگالش، $G_N - G_S$، سرب با استفاده از شکل ۱۰-۴ ؛

(ب) dB_c/dT در T_c برای آلومنیوم (با حجم مولی $10^{-5} m^3$) به کمک شکل ۱۰-۶ ؛

(ج) مساحت سطح مقطع استوانه‌ای از جنس قلع با استفاده از شکل ۱۰-۱۶ (ب)؛

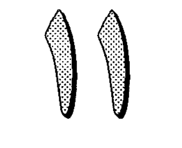
(د) گاف انرژی سرب به کمک شکل ۱۰-۲۱؛

(هـ) کوانتوم شار از روی شکل ۱۰-۲۲ ؛

(و) مساحت سطح حلقه‌ای شامل پیوندگاه دوگانه با استفاده از شکل ۱۰-۲۳ (ب).

روشن خواهد شد که پرتوهای X کلکی بیش نیست.

لردکلوین (۱۲۷۲/۱۸۹۳)



امواج در بلورها

۱۱-۱ مقدمه

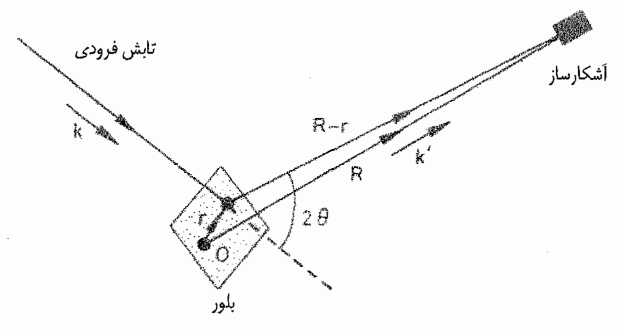
دینامیک شبکهٔ زنجیری از اتمها (بخش ۲-۳-۱) وجوه مشترکی با حالتهای الکترونی این زنجیر (بخش ۴-۳-۳) و نیز با دینامیک زنجیری از گشتاورهای مغناطیسی (بخش ۸-۵) دارد. در هر مورد باید N معادلهٔ جفت شده با یک معادله برای هر اتم، (معادلات (۲-۷)، (۴-۹) و (۸-۲۶)) را حل کرد، و جواب موج گونه به شکل $exp\ [i\,(kna - \omega t\,)]$ است، که در آن مکانهای اتمی در $x = na$ هستند؛ بسامد ω برحسب k با دورهٔ $2\pi/a$ دوره‌ای است.

در این فصل تعمیم این مفهومها به ساختارهای بلوری اختیاری در سه بعد را بحث می‌کنیم. در آغاز پراش امواجی که از یک چشمه خارجی بر بلور فرود می‌آیند را مشروح‌تر از بخش ۱-۴ بررسی می‌کنیم. این کار ما را قادر به معرفی مفهوم مفید و مهم شبکه وارون می‌سازد. سپس توضیح می‌دهیم که چرا انتظار می‌رود حرکتهای داخلی بلور موج گونه باشد و چگونه نظم روابط پاشندگی این امواج در فضای k توسط شبکهٔ وارون تعیین می‌شود.

۱۱-۲ پراکندگی‌کشسانی امواج توسط بلور

۱۱-۲-۱ دامنهٔ موج پراکنده

قانون براگ، معادلهٔ (۱-۳)، زوایای تابش فرودی نسبت به صفحات شبکه را که برای ستیغهای پراش رخ می‌دهد مشخص می‌کند، ولی در مورد شدت باریکه‌های پراشیده هیچ اطلاعی نمی‌دهد. برای محاسبهٔ شدتها به رهیافت مشروح‌تری نیاز است. فرض می‌کنیم، یک موج تخت



شکل ۱۱-۱ : هندسهٔ یک آزمایش برای مشاهدهٔ تابش پراکنده شده از بلور. برای پراکندگی کشسان $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ و $\hbar\mathbf{K} = \hbar(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$ تغییر اندازه حرکت ذرات فرودی است. نماد 2θ برای زاویه انحراف با آنکه در بخش ۱-۴ به کار رفته است سازگار است.

$A_\circ \exp[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)]$ مانند شکل ۱۱-۱ بر اتم واقع در مکان r درون بلور فرود آید. برای آنکه بحث تا حد امکان عام بماند، طبیعت تابش را مشخص نمی‌کنیم؛ پرتوهای X، الکترونها و نوترونها کاوهایی هستند که در مطالعات پراش بیشتر به کار می‌روند. بخشی از تابش فرودی به طور کشسان پراکنده می‌شود[1]. اگر پراکندگی ضعیف باشد، سهم واقع در $\mathbf{r}$ در موج پراکنده شده در آشکارسازی به فاصلهٔ بزرگ $|\mathbf{R} - \mathbf{r}|$ از اتم (شکل ۱۱-۱) رامی توان به شکل حاصل ضرب سه عامل نوشت :

$$A_r = A_\circ\, e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t_\circ)} \times f \times \frac{e^{ik|\mathbf{R}-\mathbf{r}|}}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|} \qquad (۱-۱۱)$$

عامل اول موج فرودی است؛ برای پراکندگی ضعیف، دامنهٔ $A_\circ$ این موج عملاً برای تمام اتمهای بلور یکسان است. عامل دوم، f، **عامل شکل اتمی** یا **عامل پراکندگی اتمی** است، و به جزئیات برهم کنش تابش با اتم بستگی دارد؛ بزرگی f نشانگر قدرت برهم کنش است و f به طور عام به زاویهٔ پراکندگی (2θ در شکل ۱۱-۱) بستگی دارد. عامل نهایی در معادلهٔ (۱۱-۱) نمایشگر کاهش دامنه و تغییر فاز مربوط به چشمهٔ نقطه‌ای در مکان اتم است. در مورد آشکارسازی به فاصلهٔ زیاد، کاهش دامنه برای تمام اتمهای بلور عملاً یکسان است و می‌توان به جای $|\mathbf{R} - \mathbf{r}|$ در مخرج R، فاصلهٔ آشکارساز از مبداء محورهای بلورشناسی را قرار داد؛ این تعویض را نباید در عامل فاز انجام داد، زیرا تغییر این عامل از یک اتم به اتم دیگر باعث تغییرات بزرگی در سگینال در محل آشکارساز می‌شود. توجه کنید که در مورد پراکندگی کشسان، عدد

۱- چون بلور یک جسم سنگین است، می‌تواند تغییر اندازه حرکت ذرهٔ فرودی را بدون گرفتن انرژی از آن جذب کند (مسئلهٔ ۱۱-۱ را ببینید). پراکندگی ناکشسان در فصل ۱۲ بررسی می‌شود.

موج و بسامد تابش پراکنده شده با عدد موج و بسامد تابش فرودی یکسان است.

موج در محل آشکارساز دوردست با یک موج تخت با بردار موج $\mathbf{k}'$، $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$، که تقریباً هم با $\mathbf{R}$ و هم با $\mathbf{R} - \mathbf{r}$ موازی است تقریب زده می‌شود. بنابراین، با تقریب خوب، می‌توان نوشت

$$k\,|\,\mathbf{R}-\mathbf{r}\,| \approx \mathbf{k}'.(\mathbf{R}-\mathbf{r}) = \mathbf{k}'.\mathbf{R} - \mathbf{k}'.\mathbf{r} \approx kR - \mathbf{k}'.\mathbf{r}$$

سپس معادلهٔ (۱۱-۱) را می‌توان چنین نوشت

$$A_r \approx A_\circ \frac{e^{i(\kappa R - \omega t)}}{R} f e^{i\,\mathbf{k}.\mathbf{r}}$$

که در آن $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ **بردار پراکندگی** نامیده می‌شود. عامل $A_\circ\ exp\,[i\,(kR - \omega t)]/R$ برای همهٔ اتمهای بلور یکسان است و در محاسبهٔ موج پراکنده کل در محل آشکارساز که در آن سهمهای پراکندگی تمام اتمها جمع‌زده می‌شود، فاکتورگیری می‌شود، بنابراین می‌توان از این عامل چشم‌پوشی کرد. جملهٔ مهم $f exp\,(-i\,\mathbf{k}.\mathbf{r})$ است، که شامل اختلافهای فاز بین سهمهای اتمهای گوناگون است. در نتیجه دامنهٔ موج پراکنده شده متناسب است با

$$A \sum_n f_n\ e^{i\,\mathbf{k}.\mathbf{r}_n} \tag{۲-۱۱}$$

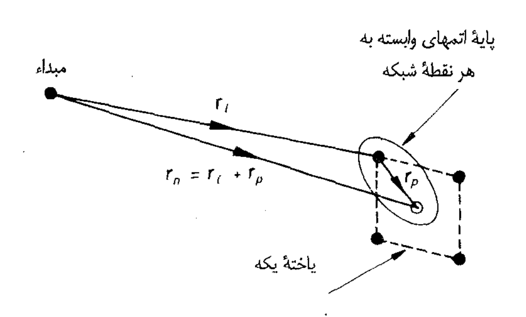
که در آن مجموعیابی روی تمام اتمهای بلور و f_n عامل پراکندگی اتمی اتم nام است[1].

نظم ساختار اتمی در یک بلور به این معنا است که، برای تابش فرودی از جهتهای خاص پراکندگی از اتمها به طور همفاز با هم جمع می‌شوند و یک دامنهٔ پراکندگی بزرگ در جهت خاصی را به بار می‌آورند. برای محاسبهٔ جهتها و شدتهای باریکه‌های پراشیده معادلهٔ (۱۱-۲) را به کار می‌بریم. از آنجا که می‌توان با مربوط کردن پایه‌ای از اتمها به هر نقطهٔ شبکه، ساختار بلوری را ساخت (بخش ۱-۲)، موقعیت هر اتم n را می‌توان چنین نوشت

$$\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_l + \mathbf{r}_p \tag{۳-۱۱}$$

که در آن $\mathbf{r}_l$ مکان نقطه شبکه‌ای است که اتم n به آن وابسته است و $\mathbf{r}_p$ همان طور که در شکل (۱۱-۳) نشان داده شده است مکان این اتم نسبت به نقطهٔ شبکه است. با استفاده از معادلهٔ (۱۱-۳) می‌توان معادلهٔ (۱۱-۲) را چنین فاکتورگیری کرد.

۱- معادلهٔ (۱۱-۲) فقط برای پراکنندگی ضعیف معتبر است زیرا در آن پراکندگی چندگانه و تضعیف موج فرودی توسط بلور چشم‌پوشی می‌شود؛ این تقریب معمولاً برای نوترونها و پرتوهای X خوب است ولی برای الکترونها خوب نیست.



شکل ۱۱-۲: مکان $\mathbf{r}_n$ هر اتم در بلور را می‌توان به صورت $\mathbf{r}_l + \mathbf{r}_p$ نوشت، که در آن $\mathbf{r}_l$ مکان نقطهٔ شبکه‌ای است که اتم به آن وابسته است و $\mathbf{r}_p$ مکان اتم نسبت به نقطهٔ شبکه است. مرزهای یاختهٔ یکهٔ بسیطی که حاوی اتم است نیز نشان داده شده است.

$$A=\left(\sum_l e^{-i\,\mathbf{k}.\mathbf{r}_l}\right)\times\left(\sum_p f_p\, e^{-\mathbf{K}.\mathbf{r}_p}\right) \qquad (۱۱-۴)$$

(مجموعیابی روی اتمهای پایه) × (مجموعیابی روی نقاط شبکه) =

جملهٔ اول، که می‌توان آن را به منزلهٔ مجموعیابی روی یاخته‌های یکهٔ بسیط در بلور نیز در نظر گرفت حاوی اطلاعات مربوط به شبکهٔ بلور است، و در نتیجه، این جمله است که جهتهایی راکه برای آنها پراش رخ می‌دهد تعیین می‌کند. جملهٔ دوم، که یک جمع‌بندی روی محتوای یاخته یکّه بسیط است، بنابراین مجموعیابی روی تعداد نسبتاً کمی از اتمهاست (برای اغلب ساختارها فقط یک اتم) و برای تمام نقاط شبکه یکسان است؛ این جمله به **عامل ساختار** معروف است و شدتهای نسبی باریکه‌های پراشیده را تعیین می‌کند. ما این دو جمله را به ترتیب بررسی می‌کنیم.

۱۱-۲-۲ شرایط لاوه برای پراش و شبکهٔ وارون

با استفاده از معادلهٔ (۱-۲)

$$\mathbf{r}_l = u\,\mathbf{a} + v\,\mathbf{b} + \omega\mathbf{c}$$

برای مکانهای نقاط شبکه می‌توان جملهٔ اول معادلهٔ (۱۱-۴) را به شکل زیر نوشت

$$\sum_l e^{-\mathbf{K}.\mathbf{r}_l} = \sum_u e^{-i\,\mathbf{K}.\mathbf{a}u} \sum_v e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{b}v} \sum_w e^{-i\mathbf{K}.\mathbf{c}w} \qquad (۱۱-۵)$$

وقتی سهمهای ناشی از تمام نقاط شبکه همفاز باشند، دامنهٔ پراکندگی بزرگی حاصل می‌شود و

این به شرطی رخ می‌دهد که

$$\mathbf{K.a} = 2\pi h \qquad \text{(۱۱-۶الف)}$$

$$\mathbf{K.b} = 2\pi k \qquad \text{(۱۱-۶ب)}$$

$$\mathbf{K.c} = 2\pi l \qquad \text{(۱۱-۶ج)}$$

که در آن h ، κ و l اعداد درست‌اند. معادلات (۱۱-۶) **شرایط لاوه** برای پراش‌اند. وقتی این معادلات ارضا شوند، هر جمله در معادلهٔ (۱۱-۵) برابر یک است و بنابراین برای بلوری با گستره N_1 ، N_2 و N_3 فاصلهٔ شبکه‌ای به ترتیب در جهتهای x، yو zمجموع برابر $N_1N_2N_3$ است. $N_1N_2N_3$البته درست برابر با تعداد یاخته‌های یکّهٔ بسیط درون بلور است. معادلات (۱۱-۶) شرایط پراش در یک توری پراش سه بعدی‌اند؛ مقایسه با نتایج مربوط به توری اپتیکی یک بعدی (فصل ۱۱ مرجع ۵ در فهرست کتابشناسی آخر کتاب) نشان می‌دهد که وقتی $\mathbf{K}$ از مقداری که این معادلات را ارضا می‌کند تغییر کند دامنهٔ پراکنده شده سریعاً کاهش می‌یابد.

جهتهای باریکه‌های پراشیده، توسط مجموعه‌ای از بردارهای $\mathbf{K}$ که معادلات (۱۱-۶) را ارضا می‌کنند داده می‌شود. این بردارها را می‌توان با استفاده از مفهوم **شبکهٔ وارون** به روش برازنده‌ای نشان داد. برای بیان این مفهوم مهم نخست توجه می‌کنیم که فضای $\mathbf{k}$ (که گاهی **فضای وارون** نامیده می‌شود) فضای مناسب برای رسم بردارهای موج است. مقادیر بردار پراکندگی $\mathbf{K}$ که شرایط لاوه را ارضا می‌کنند بر روی شبکهٔ منظمی در این فضا قرار می‌گیرند؛ این شبکه، شبکه وارون است. با استفاده از معادلهٔ

$$\mathbf{G}_{h\kappa l} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* \qquad \text{(۱۱-۷)}$$

که در آن h ، κ و l اعداد درست‌اند، تمام نقاط شبکهٔ وارون را می‌توان از این سه بردار شبکهٔ وارون $\mathbf{a}^*$ ، $\mathbf{b}^*$ و $\mathbf{c}^*$ تولید کرد؛ این شبیه کاربرد بردارهای انتقال شبکه بسیط $\mathbf{a}$ ، $\mathbf{b}$ و $\mathbf{c}$ برای تعریف نقاط شبکه‌ای بلوری در فضای واقعی سه بعدی معادلهٔ (۱-۲) است. اکنون ثابت می‌کنیم که، اگر

$$\mathbf{K} = \mathbf{G}_{h\kappa l} \qquad \text{(۱۱-۸)}$$

که در آن $\mathbf{G}_{h\kappa l}$ **هر بردار** شبکهٔ وارون است، و با مقادیر زیر برای $\mathbf{a}^*$ ، $\mathbf{b}^*$ و $\mathbf{c}^*$

$$\mathbf{a}^* = \frac{2\pi(\mathbf{b}\times\mathbf{c})}{\mathbf{a}.(\mathbf{b}\times\mathbf{c})}, \qquad \mathbf{b}^* = \frac{2\pi(\mathbf{c}\times\mathbf{a})}{\mathbf{a}.(\mathbf{b}\times\mathbf{c})}, \qquad \mathbf{c}^* = \frac{2\pi(\mathbf{a}\times\mathbf{b})}{\mathbf{a}.(\mathbf{b}\times\mathbf{c})}, \qquad \text{(۱۱-۹)}$$

آنگاه $\mathbf{K}$ شرایط لاوه را ارضا می‌کند. برای اثبات، $\mathbf{K.a}$ را به قرار زیر محاسبه می‌کنیم

$$\mathbf{K.a} = \mathbf{G}_{h\kappa l}.\mathbf{a} = (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*).\mathbf{a} = 2\pi h$$

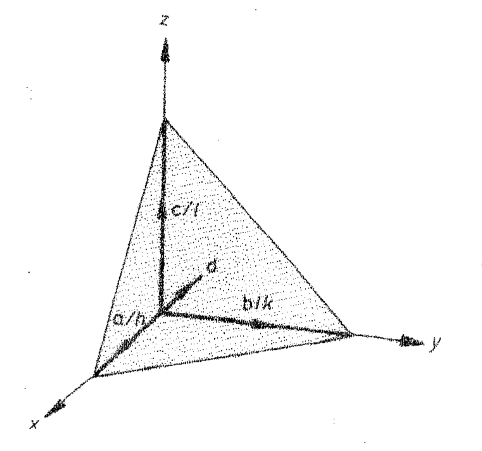
که در آن روابط زیر را به کار برده‌ایم

$$\mathbf{a}^*.\mathbf{a}=2\pi \quad , \qquad \mathbf{b}^*.\mathbf{a}=\mathbf{c}^*.\mathbf{a}=0 \qquad (11\text{-}10)$$

که از تعریفهای (۱۱-۹) نتیجه می‌شود[1]. بنابراین اگر $\mathbf{K}$ با $\mathbf{G}_{h\kappa l}$ مساوی باشد معادلهٔ (۱۱-۶ الف) ارضا می‌شود؛ محاسبهٔ $\mathbf{b}$. $\mathbf{G}_{h\kappa l}$ و $\mathbf{c}$. $\mathbf{G}_{h\kappa l}$ نشان می‌دهد که $\mathbf{K}$ ، معادلات (۱۱-۶ ب) و (۱۱-۶ پ) را نیز ارضا می‌کند.

روابط (۱۱-۱۰) به این معناست که $\mathbf{b}^*$ و $\mathbf{c}^*$ بر $\mathbf{a}$ عمودند. نمی‌توان نتیجه گرفت که $\mathbf{a}$ و $\mathbf{a}^*$ موازی‌اند؛ این مورد فقط در صورتی رخ می‌دهد که محورهای بلور برهم عمود باشند. به خاطر سپردن تعریفهای (۱۱-۹) با توجه به این نکته که وقتی $\mathbf{a}^*$ تعریف شود، $\mathbf{b}^*$ و $\mathbf{c}^*$ را می‌توان با تغییر دوره‌ای $\mathbf{a}$، $\mathbf{b}$ و $\mathbf{c}$ نوشت آسانتر می‌شود. توجه داریم که مخرج $\mathbf{a}.(\mathbf{b}\times\mathbf{c})$ در این تعریفها، با یک جایگشت دوره‌ای تغییر نمی‌کند؛ این مقدار در حقیقت حجم یک یاختهٔ یکّه است. از تقارن معادلات (۱۱-۹) نتیجه می‌شود که معادلات (۱۱-۱۰) را می‌توان با $\mathbf{b}^*.\mathbf{b}=2\pi$ ، $\mathbf{c}^*.\mathbf{c}=2\pi$ و روابطی که تعامد $\mathbf{a}^*$ و $\mathbf{c}^*$ بر $\mathbf{b}$ و $\mathbf{a}^*$ و $\mathbf{b}^*$ بر $\mathbf{c}$ را نشان می‌دهند تکمیل کرد.

از آنجا که بردار پراکندگی هر باریکهٔ پراشیده به نقطه‌ای در شبکهٔ وارون از قرار معادلهٔ (۱۱-۷) مربوط می‌شود می‌توان از اعداد درست $(h\kappa l)$ برای برچسب زدن آن باریکه استفاده کرد. اکنون نشان می‌دهیم که این برچسب زدن با برچسب زدنی که در بخش (۱-۴) مطرح شده یکسان است، در آنجا باریکه‌های پراشیده توسط شاخصهای میلر صفحات شبکه‌ای که به آن باریکه‌ها مربوط می‌شوند برچسب زده می‌شدند. با این کار همچنین نشان می‌دهیم که معادلات (۱۱-۶) یا معادلهٔ (۱۱-۸) با قانون براگ، معادلهٔ (۱-۳)، معادل‌اند. نخست رابطهٔ بین بردار



شکل ۱۱-۳: نخستین صفحهٔ $(h\kappa l)$ از مبداء به ترتیب محورهای x y و z را در a/h ، b/k و c/l قطع می‌کند. بردار $\mathbf{d}$ بر این صفحه عمود است و طولش برابر فاصله بین صفحه‌ای است. رابطهٔ $\mathbf{a}.\mathbf{b}\,/h=d^2$ (معادلهٔ (۱۱-۱۱)) نتیجه می‌شود زیرا مؤلفهٔ $\mathbf{a}/h$ در راستای جهت $\mathbf{d}$ برابر بر $|\,\mathbf{d}\,|$ است.

۱- روابط (۱۱-۱۰) صحیح‌اند زیرا $\mathbf{a}.(\mathbf{b}\times\mathbf{c})=\mathbf{a}.(\mathbf{b}\times\mathbf{c})$ و $(\mathbf{c}\times\mathbf{a}).\mathbf{a}$ و $(\mathbf{a}\times\mathbf{b}).\mathbf{a}$ صفر می‌شوند؛ زیرا حاصل ضرب نرده‌ای دو بردار عمود بر هم برابر صفر است.

شبکهٔ وارون $\mathbf{G}_{h\kappa l}$ و مجموعهٔ صفحات شبکه با شاخصهای میلر $(h\kappa l)$ را مشخص می‌کنیم. نزدیکترین صفحهٔ $(h\kappa l)$ به مبداء در شکل (۱۱-۳) نشان داده شده است، می‌بینیم که یک بردار $\mathbf{d}$ عمود بر این صفحات و با طول مساوی با فاصلهٔ بین این صفحات روابط زیر را ارضا می‌کند

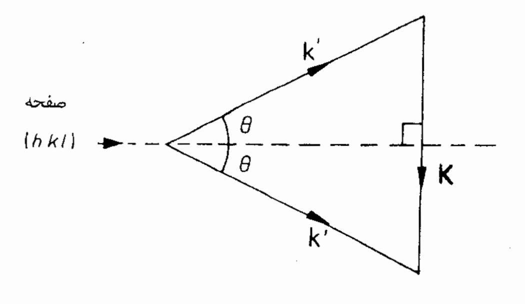
$$\mathbf{d.a}\ /h=\mathbf{d.b}\ /k=\mathbf{d.c}\ /l=d^{2} \tag{۱۱-۱۱}$$

از نظر شکل، این معادلات با معادلات (۱۱-۶) که بردارهای پراکندگی باریکه‌های پراشیده را تعیین می‌کنند مشابه‌اند. با بهره‌گیری از این تشابه در می‌یابیم که، با مانستگی با معادلهٔ (۱۱-۸)، $\mathbf{d}$ را می‌توان چنین نوشت

$$\mathbf{d}=\frac{d^{2}}{2\pi}\ (h\mathbf{a}^{*}\ +k\mathbf{b}^{*}\ +l\mathbf{c}^{*}\ )=\frac{d^{2}}{2\pi}\ \mathbf{G}_{h\kappa l} \tag{۱۱-۱۲}$$

این را می‌توان با جایگذاری مستقیم در معادلات (۱۱-۱۱) و استفاده از معادلات (۱۱-۹) نشان داد. معادلهٔ (۱۱-۱۲) نشان می‌دهد که بردار شبکهٔ وارون $\mathbf{G}_{h\kappa l}$ بر صفحات شبکه با شاخصهای $(h\kappa l)$ عمود و دارای طول $2\pi/d$ است، که در آن d فاصله بین صفحات است.

تعبیر قانون براگ به منزلهٔ «بازتاب» امواج از صفحات شبکه در شکل (۱۱-۴) نشان داده شده است. استفاده از یک هندسهٔ ساده (به یاد بیاورید که $|\mathbf{k}|=|\mathbf{k}'|$) نشان می‌دهد که بردار پراکندگی $\mathbf{K}$ بر ای صفحات عمود است و بنابراین همان طورکه معادلهٔ (۱۱-۸) ایجاب می‌کند، بردار پراکندگی $\mathbf{K}$ با بردار $\mathbf{G}_{h\kappa l}$ موازی است. بزرگی $\mathbf{K}$ ($|\mathbf{K}|=2|\mathbf{k}|\sin\theta$) با استفاده از شکل (۱۱-۴) با بزرگی $\mathbf{G}_{h\kappa l}$ برابر است به شرطی که $2|\mathbf{k}|\sin\theta=2\pi/d$، یعنی اگر $2d\sin\theta=\lambda$، که درست همان قانون براگ برای پراش مرتبهٔ اول است. فرمولبندی لاوه و براگ در مورد شرایط پراش کاملاً معادل‌اند و همین طور هم استفاده از بردارهای شبکهٔ وارون معادل است با استفاده از شاخصهای میلر برای برچسب زدن باریکه‌های پراشیده. همان‌طورکه قبلاً در بخش ۱-۴ نشان داده شد وقتی برای توصیف شبکه از یک یاخته یکّه استفاده می‌شود،



شکل ۱۱-۴ : فرمولبندی پراش براگ دارای باریکه‌های فرودی و پراشیده است که هر یک با صفحات شبکه زوایای یکسان θ می‌سازند. بنابراین، چون $|\mathbf{k}|=|\mathbf{k}'|$، $\mathbf{K}$ بر صفحات شبکه عمود است.

مرتبه‌های بالاتر پراش با ظهور یک عامل مشترک در (hkl) نشان داده می‌شود. بنابراین (۱۰۰)، (۲۰۰) و (۳۰۰) به ترتیب به پراش‌های مرتبهٔ اول، دوم و سوم مربوط می‌شوند.

شبکهٔ وارون برای بحث پراش امواج توسط یک بلور چنان مهم است و کاربرد وسیعی دارد که به تکرار نتیجهٔ کلی این بخش می‌ارزد. برای تابش فرودی با بردار موج $\mathbf{k}$، جهتهای باریکه‌های پراشیده توسط بردار موجهای $\mathbf{k'} = \mathbf{k} + \mathbf{K}$ بیان می‌شوند، که در آن بردار پراکندگی $\mathbf{K}$ بردار مکانی هر نقطه‌ای از شبکهٔ وارون در فضای $\mathbf{k}$ است. نقاط شبکهٔ وارون توسط معادلهٔ (۱۱-۷) بیان می‌شوند و بردارهای شبکهٔ بسیط شبکهٔ وارون توسط بردارهای شبکهٔ بسیط شبکهٔ فضای حقیقی و با استفاده از معادلهٔ (۱۱-۹) تعیین می‌شوند.

۱۱-۲-۳ مثالهایی از شبکه‌های وارون

برای بحث در مورد مثالهای زیر رجوع به مجموعه‌ای از محورهای دکارتی که با کاربردهای یکّهٔ متقابلاً عمود $\mathbf{i}$، $\mathbf{j}$ و $\mathbf{k}$ تعریف می‌شود را مفید خواهیم یافت.

شبکهٔ فضای حقیقی مکعبی ساده

برحسب محورهای دکارتی، داریم

$$\mathbf{a} = a\mathbf{i}, \qquad \mathbf{b} = a\mathbf{j}, \qquad \mathbf{c} = a\mathbf{k} \tag{۱۱-۱۳}$$

بنابراین $\mathbf{a} = (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = a^{3}$ و با استفاده از معادله (۱۱-۹)[1] داریم

$$\mathbf{a}^* = \frac{2\pi}{a}\,\mathbf{i} \qquad \mathbf{b}^* = \frac{2\pi}{a}\,\mathbf{j} \qquad \mathbf{c}^* = \frac{2\pi}{a}\,\mathbf{k} \tag{۱۱-۱۴}$$

بنابراین شبکهٔ وارون نیز مکعبی ساده به ضلع $2\pi/a$ و در همان سمتگیری شبکهٔ فضای حقیقی است.

شبکهٔ فضایی حقیقی مرکز سطحی

محورهای دکارتی را در راستای اضلاع یاختهٔ یکّهٔ مکعبی قراردادی اختیار می‌کنیم. بنابراین بردارهای انتقال بسیط که در مکعب سمت راست شکل (۱۱-۵) نشان داده شده‌اند عبارتند از

$$\mathbf{a} = \frac{a}{2}\,(\mathbf{j} + \mathbf{k}), \qquad \mathbf{b} = \frac{a}{2}\,(\mathbf{k} + \mathbf{i}), \qquad \mathbf{c} = \frac{a}{2}\,(\mathbf{i} + \mathbf{j}) \tag{۱۱-۱۵}$$

که در آن a ضلع یاختهٔ بسیط مکعبی قراردادی است. بنابراین $\mathbf{a}\,.\,(\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \frac{a^{3}}{4}$ و با استفاده از معادلات (۱۱-۹) درمی‌یابیم که

۱- به یاد بیاورید که $\mathbf{i} \times \mathbf{j} = \mathbf{k}$، $\mathbf{j} \times \mathbf{k} = \mathbf{i}$ و $\mathbf{k} \times \mathbf{i} = \mathbf{j}$

معادلات (۱۱-۹) درمی‌یابیم که

$$\mathbf{a}^* = \frac{2\pi}{a}\ (\mathbf{i}+\mathbf{k}-\mathbf{i})\ ,\qquad \mathbf{b}^* = \frac{2\pi}{\mathbf{a}}\ (\mathbf{k}+\mathbf{i}-\mathbf{j})\ ,\quad \mathbf{c}^* == \frac{2\pi}{a}\ (\mathbf{i}+\mathbf{j}-\mathbf{k}) \quad (16\text{-}11)$$

اینها بردارهای انتقال بسیط برای یک شبکهٔ وارون مکعبی **مرکز حجمی** با یاختهٔ یکّه مکعبی به ضلع $4\pi/a$اند. اینکه شبکهٔ وارون bcc است در شکل (۱۱-۵) نشان داده شده است. واضح است که $\mathbf{a}\times\mathbf{b}$ که موازی با $\mathbf{c}^*$ است به سوی موقعیت مرکز حجم مکعب سمت راست جهت‌گیری می‌کند. نتیجه می‌شود که یاخته‌های یکّهٔ مکعبی قراردادی شبکهٔ فضایی حقیقی و شبکهٔ وارون دارای سمتگیری یکسانند. توجه کنید که برچسب‌زنی باریکه‌های پراشیده که برمبنای بردارهای انتقال بسیط فوق قرار دارد متناظر است با برچسب‌زنی براساس شاخصهای میلر برای یاختهٔ یکّه بسیط و بنابراین با برچسب‌زنی براساس شاخصهای میلر برای یاختهٔ یکّهٔ مکعبی قراردادی تفاوت دارد (مسئلهٔ ۱۱-۵ را ببینید)

شبکهٔ فضای حقیقی مکعبی مرکز حجمی

این یک نتیجهٔ کلی است که شبکهٔ وارون شبکهٔ وارون مجدداً شبکهٔ فضای حقیقی را به بار می‌آورد (مسئله ۱۱-۲)؛ لذا شبکهٔ وارون یک شبکهٔ bcc یک شبکهٔ fcc است. اگر یاختهٔ یکّهٔ قراردادی دارای ضلع a باشد، بردارهای انتقال بسیط شبکهٔ فضای حقیقی عبارتند از

$$\mathbf{a} = \frac{a}{2}\ (\mathbf{i}+\mathbf{k}-\mathbf{i}),\qquad \mathbf{b} = \frac{a}{2}\ (\mathbf{k}+\mathbf{i}-\mathbf{j})\ ,\quad \mathbf{c} = \frac{a}{2}\ (\mathbf{i}+\mathbf{j}-\mathbf{k}) \quad (17\text{-}11)$$

در نتیجه $\mathbf{a}.(\mathbf{b}\times\mathbf{c}) = \frac{a^3}{2}$ و

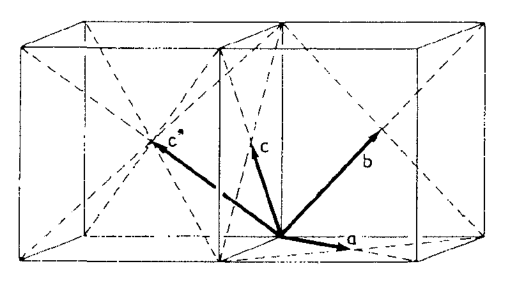
$$\mathbf{a}^* = \frac{2\pi}{a}\ (\mathbf{j}+\mathbf{k}),\qquad \mathbf{b}^* = \frac{2\pi}{a}\ (\mathbf{k}+\mathbf{i})\ ,\quad \mathbf{c}^* = \frac{2\pi}{a}\ (\mathbf{i}+\mathbf{j}) \quad (18\text{-}11)$$

اینها بردارهای انتقال بسیط برای یک شبکهٔ وارون fcc با یاختهٔ یکّه مکعبی به ضلع $\frac{4\pi}{a}$ اند.

شبکهٔ فضای حقیقی ششگوشی

این شبکه، برای مثال، شبکهٔ ساختار تنگ پکیدهٔ ششگوش شکل ۱-۱۱ است و بردارهای شبکهٔ بسیط برحسب محورهای دکارتی عبارتند از

$$\mathbf{a} = a\mathbf{i}\ ,\qquad \mathbf{b} = a\left(-\frac{\mathbf{i}}{2}+\frac{\sqrt{3}\,\mathbf{i}}{2}\right),\qquad \mathbf{c} = c\mathbf{k} \quad (19\text{-}11)$$



شکل ۱۱-۵: زوجهای بردارهای شبکهٔ بسیط شبکهٔ fcc در صفحات {۱۱۱} قرار می‌گیرند. بردارهای شبکه وارون بر یکدیگر عمودند و بنابراین در جهتهای موازی با قطرهای حجمی مکعب‌اند (برای مثال جهت [۱۱۱]). اینها جهتهای بردار بسیط شبکهٔ bcc اند.

بنابراین $\mathbf{a}.(\mathbf{b}\times\mathbf{c}) = \left(\frac{\sqrt{۳}}{۲}\right) a^{۲} c$ و

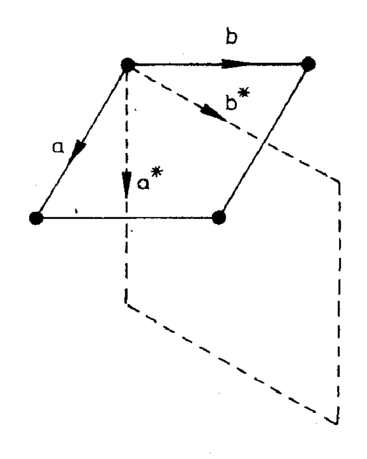
$$\mathbf{a}^* = \frac{۴\pi}{\sqrt{۳}a}\left(\frac{\sqrt{۳}\,\mathbf{i}}{۲} + \frac{\mathbf{j}}{۲}\right), \quad \mathbf{b}^* = \frac{۴\pi\,\mathbf{j}}{\sqrt{۳}\,a}, \qquad \mathbf{c}^* = \frac{۲\pi\,\mathbf{k}}{c} \quad (۲۰\text{-}۱۱)$$

اینها بردارهای انتقال بسیط یک شبکهٔ وارون ششگوشی‌اند. سمتگیری نسبی شبکه‌های فضای حقیقی و فضای وارون در شکل ۱۱-۶ نشان داده شده است.

۱۱-۲-۴ عامل ساختار

عامل دوم در معادلهٔ (۱۱-۴)، یا عامل ساختار

$$\mathbf{S} = \sum_{p} f_p \; e^{-i\mathbf{K}.\mathbf{r}_p} \qquad (۲۱\text{-}۱۱)$$



شکل ۱۱-۶: سمتگیری نسبی شبکه‌های فضای حقیقی و فضای وارون برای یک شبکهٔ ششگوشی؛ بردارهای $\mathbf{c}^*$ و $\mathbf{c}$ موازی‌اند.

یک مجموعیابی روی اتمهای موجود در پایه است، که در آن $\mathbf{r}_p$ مکان اتم نسبت به نقطهٔ شبکه است. آسانترین وضعیت در مورد پایه‌ای است با یک اتم بر روی هر نقطهٔ شبکه. در نتیجه S شامل یک جمله است، که برای آن $\mathbf{r}_p = 0$. بنابراین

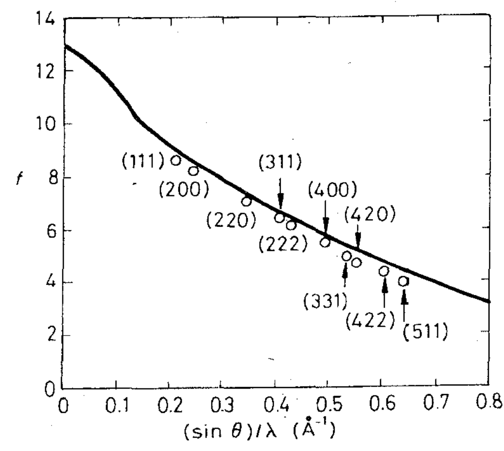
$$S=f$$

و تنها در شدت ستیغهای پراشیده ناشی از تغییر زاویه‌ای عامل شکل اتمی f است. این تغییر معمولاً هموار و تکنوا است به طوری که ستیغهای پراش مجاور دارای شدتهای مشابهند. شکل ۱۱-۷ وابستگی زاویه‌ای f برای پرتوهای X برای آلومینیم تنگ پکیدهٔ مکعبی را نشان می‌دهد که از ستیغهای پراشیدهٔ نشان داده شده استنتاج شده است؛ f به صورت تابعی از $(\sin\theta)/\lambda$ نشان داده شده است که در آن θ زاویهٔ براگ است.

ساختار تنگ پکیدهٔ ششگوشی شکل ۱-۱۱ دارای پایه‌ای با دو اتم یکسان در $\mathbf{r}_1 = 0$ و $\mathbf{r}_2 = \frac{1}{3}\mathbf{a} + \frac{2}{3}\mathbf{b} + \frac{1}{2}\mathbf{c}$ است. بنابراین برای باریکهٔ پراشیدهٔ (hkl) داریم

$$\begin{aligned} S &= f\{exp(i\,0) + exp[-i(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*).(\tfrac{1}{3}\mathbf{a} + \tfrac{2}{3}\mathbf{b} + \tfrac{1}{2}\mathbf{c})]\} \\ f &= \{1 + exp[-i\pi(\tfrac{2}{3}h + \tfrac{4}{3}k + l)]\} \\ &= f\{1 + exp[-i\pi((h+k+l) + \tfrac{1}{3}(k-h))]\} \end{aligned} \tag{۲۲-۱۱}$$

که در آن از معادلات (۱۱-۷) و (۱۱-۸) و ویژگیهای بردارهای بسیط شبکهٔ وارون استفاده



شکل ۱۱-۷: عامل شکل اتمی برای آلومینیم که با استفاده از شدتهای ستیغهای پراش نشان داده شده تعیین شده‌اند. برچسب زدن بر مبنای یاخته یکّه مکعبی قراردادی است. منحنی پر یک پیش‌بینی نظری است. (با اجازه از مقالهٔ دبلیو بترمن[1]، دی‌آرچیمن[2] و ج ج دی مارکو[3] در *Phys. Rev.* **122**, *68 (1961)* **اقتباس شده است).**

۱- *W. Batlerman*
۲- *D. R. Chipman*
۳- *J. J. deMarco*

کرده‌ایم (معادلات (۱۱-۱۰) را ببینید). شدت باریکهٔ پراشیده، با $|S|^2$ متناسب است، این می‌تواند بسته به h، k و l چهار مقدار ممکن داشته باشد (مسئلهٔ ۱۱-۳). در مورد برخی باریکه‌های پراشیده، به خصوص باریکهٔ (۰۰۱)، شدت صفر می‌شود. بنابراین، به دلیل تداخل ویرانگر مربوط به پراکندگی از دو اتم در پایه، برخی از باریکه‌های پراشیدهٔ ممکن که توسط معادلهٔ (۱۱-۸) پیش‌بینی شدند حضور ندارند.

در این مورد بهتر است بیشتر توضیح دهیم. صفر شدن S برای ساختار hcp به طور قاطع به فرض عاملهای شکل یکسان برای هر دو اتم موجود در پایه بستگی دارد. با وجودی که این اتمها از نظر شیمیایی یکسانند، ولی محیط اطراف آنها درون بلور متفاوت است؛ حالتهای الکترونی در داخل اتمها توسط اتمهای همسایه اندکی واپیچیده می‌شوند و این واپیچش در بستگی زاویه‌ای f منعکس می‌شود. بنابراین عاملهای شکل این دو اتم کمی با هم تفاوت دارند و باریکه‌های پراشیدهٔ بسیار ضعیفی در جهتهای ممنوع پدیدار می‌شوند. برای اتمها و یونهای تقریباً متقارن کروی که ساختارهای تنگ پکیدهٔ ششگوشی تشکیل می‌دهند، این باریکه‌های پراشیده معمولاً آنقدر ضعیف‌اند که دیده نمی‌شوند، ولی همان طور که در زیر بحث می‌شود، باریکه‌ای از این نوع برای ساختار الماسی با پیوند کووالانی مشاهده می‌شود. درس مهمی که باید فراگرفت آن است که باید نتایجی را که صرفاً توسط استدلالهای متفاوتی به دست می‌آیند (مانند پیش‌بینی جهت باریکه‌های پراشیده با استفاده از شبکهٔ وارون) از نتایجی که ناشی از نوعی تقریب است (مانند باریکه‌های پراش پیش‌بینی شدهٔ نزدیک به صفر که از برابری تقریبی عاملهای شکل اتمها در پایه ناشی می‌شود) متمایز ساخت.

قبل از محاسبهٔ ساختار در ساختارهای الماسی و کلرید سدیم، که هر دو دارای یک شبکه fccاند، برای ما مفید خواهد بود که در مورد پراش از یک ساختار fccی ساده در وضعیتی که از یاختهٔ یکّه مکعبی قراردادی به جای یاخته یکّهٔ بسیط برای تعیین شبکهٔ وارون استفاده شده را باشد، بحث می‌کنیم. برای این کار ساختار fcc چنان در نظر می‌گیریم که گویی از یک شبکه مکعبی ساده به ضلع a ساخته شده باشد و اتمهای مرکز سطحی بخشی از پایهٔ اتمهای مربوط به هر نقطهٔ شبکه را تشکیل دهند. شبکه وارون شبکه مکعبی ساده به شکل مکعبی ساده با ضلع $2\pi/a$ است (معادلهٔ (۱۱-۱۴)). شدتهای باریکه‌های پراشیده توسط عامل ساختاری، که با مجموعیابی روی اتمهای پایه در $r_1 = 0$، $r_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}+\mathbf{b})$، $r_3 = \frac{1}{2}(\mathbf{b}+\mathbf{c})$ و $r_4 = \frac{1}{2}(\mathbf{c}+\mathbf{a})$ حاصل می‌شود، بیان می‌شوند. $\mathbf{a}$، $\mathbf{b}$ و $\mathbf{c}$ بردارهای شبکه برای یاختهٔ یکّه قراردادی‌اند. بنابراین، با روشی نظیر آنچه برای ساختار hcp اعمال شده نتیجه می‌شود که

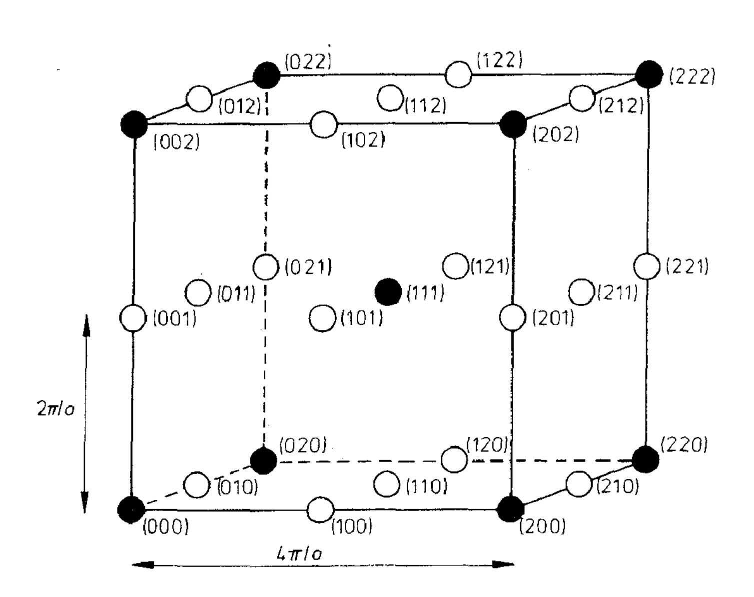
$$S = f\left(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(k+l)} + e^{i\pi(l+h)}\right) \qquad (۱۱\text{-}۲۳)$$

که در آن f عامل شکل اتمی اتمهای پایه است؛ توجه کنید که f برای هر چهار اتم پایه دقیقاً یکسان است زیرا محیط اطراف آنها یکسانند. با چند لحظه تفکر می‌توانیم نشان دهیم که S فقط دو مقدار اختیار می‌کند:

$$S \begin{cases} ۴f & \text{وقتی h ، k و l همگی فرد یا همگی زوج باشند} \\ ۰ & \text{در موارد دیگر} \end{cases} \qquad (۱۱-۲۴)$$

از شکل ۱۱-۸ می‌بینیم که باریکه‌های پراشیده که به این طریق حذف می‌شوند. دقیقاً همان باریکه‌های موردنیاز برای تبدیل شبکهٔ وارون مکعبی ساده به ضلع $۲\pi/a$ به شبکهٔ وارون مکعبی مرکز حجمی به ضلع $۴\pi/a$ که با استفاده از یاختهٔ یکّهٔ **بسیط** شبکه fcc از معادلهٔ (۱۱-۱۶) حاصل می‌شوند، هستند. بنابراین، با وجودی که برچسب‌زنی متفاوت است؛ هر دو روش به باریکه‌های پراشیدهٔ یکسانی منجر می‌شوند. (مسئله ۱۱-۵ را ببینید).

برای ساختارهای الماسی و کلریدسدیم برچسب‌زنی مناسب با یاختهٔ قراردادی مکعبی را به کار خواهیم برد. از آنجا که باریکه‌های پراشیده باید به شبکهٔ وارون شبکهٔ fcc مربوط شوند. از تحلیل بالا می‌دانیم که باریکه‌های پراشیده فقط به شرطی رخ می‌دهند که h، k، و l همگی زوج



شکل ۱۱-۸: انتخاب نقاط یک شبکهٔ مکعبی ساده به ضلع $۲\pi/a$ که برای آن مختصات (hkl) همگی فرد یا همگی زوج‌اند یک شبکهٔ مکعبی مرکز حجمی (دایره‌های توپر) به ضلع $۴\pi/a$ را تولید می‌کند.

و یا همگی فرد باشند. در مورد ساختار الماسی (شکل ۱-۱۵)، شدتهای باریکه‌ها توسط عامل ساختار پایهٔ دو اتم مربوط به هر نقطهٔ شبکه، $\mathbf{r}_1 = 0$ و $\mathbf{r}_2 = \frac{1}{4}(\mathbf{a}+\mathbf{b}+\mathbf{c})$، تعیین می‌شوند. بنابراین مانند ساختار hcp نتیجه می‌شود

$$S = f\{1 + exp[-i\,\frac{1}{2}\,\pi\,(h+k+l)]\}$$

که در آن f عامل شکل اتمهاست. بنابراین :

(۱) برای h، k و l همگی فرد

$$|S|^2 = 2f^2$$

(۲) برای h، k و l همگی زوج

$$|S|^2 = \begin{cases} 4f^2 & \text{h+k+l اگر مضربی از ۴ باشد} \\ 0 & \text{h+k+l اگر مضربی از ۴ نباشد} \end{cases}$$

پراش مشاهده شده عموماً با این پیش‌بینی‌ها توافق دارد ولی برخلاف این نتایج برای الماس یک باریکهٔ پرتو X بسیار ضعیف (۲۲۲) مشاهده می‌شود. این نشانگر قصور فرض یکسان بودن عاملهای شکل دو اتم موجود در پایه است؛ این دو اتم دارای پیوندهای کووالانی هستند که به طور چهار وجهی در سمتگیری‌های مختلف مرتب شده‌اند (شکل ۱-۱۵ ب) و چون کسر قابل ملاحظه‌ای از الکترونها در پیوند درگیرند، عاملهای شکل اتمی به اندازهٔ کافی با هم فرق دارند تا اینکه یک باریکهٔ پراشیدهٔ قابل مشاهده را باعث شوند.

در ساختار کلرید سدیم، پایهٔ اتمها عبارت است از Na^+ در $\mathbf{r}_1 = 0$ و Cl^- در $\mathbf{r}_2 = \frac{1}{2}\mathbf{a}$. بنابراین عامل ساختار عبارت است از

$$S = f_+ + f_-\, e^{i\pi h}$$

که در آن f_+ و f_- به ترتیب عاملهای شکل یونهای مثبت و منفی‌اند. بنابراین :

$$|S|^2 = \begin{cases} (f_+ - f_-)^2 & \text{برای h، k و l همگی فرد} \\ (f_+ + f_-)^2 & \text{برای h، k و l همگی زوج} \end{cases}$$

این موضوع نتیجه‌ای راکه در بخش ۱-۴ تذکر داده شده مبنی بر اینکه باریکهٔ پراشیدهٔ (۱۱۱) در پراش پرتو X از KCl مشاهده نمی‌شود تعمیم می‌دهد. چون عاملهای شکل یونهای K^+ و Cl^- تقریباً یکسانند ($f_+ \approx f_-$)؛ می‌بینیم که در KCl تمام باریکه‌های پراشیده برای h، k و l فرد بسیار کوچک و نزدیک به صفرند.

۱۱-۳ مدهای بهنجار موج گونه - قضیهٔ بلوخ

حال توجه خود را به حالتهای الکترونی و ارتعاشهای شبکهٔ یک بلور معطوف می‌کنیم. حرکتهایی که در آنها بستگی زمانی در سرتاسر بلور به شکل $e^{-i\omega t}$، یعنی در مدهای بهنجارند مورد توجه ماست. لذا این حرکتها توسط تابعی به شکل زیر مشخص می‌شوند:

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\psi(\mathbf{r})e^{-i\omega t} \tag{۲۵-۱۱}$$

نشان خواهیم داد که این حرکتها از نظر سرشتی موج گونه‌اند. نخست وضعیتی را در نظر می‌گیریم که در آن تابع $\Psi(\mathbf{r},t)$ را فقط در جایگاههای شبکه نیاز داشته باشیم. برای مثال، برای دینامیک کلاسیکی (نیوتونی) اتمها در بلوری که در آن شبکه و ساختار یکسان باشند (فقط یک اتم در هر یاختهٔ یکّهٔ بسیط وجود داشته باشد) وضع چنین است؛ در این مورد وقتی بلور ساکن است، تابع $\Psi(\mathbf{r}_l,t)$ تغییر مکان اتمی را ارائه می‌دهد که مکان شبکه $\mathbf{r}=\mathbf{r}_l$ را اشغال می‌کند.

شبکه از هر نقطهٔ شبکه یکسان دیده نمی‌شود و بنابراین N معادلهٔ حرکت مورد نیاز برای تعیین $\Psi(\mathbf{r}_l,t)$ (یک معادله برای هر اتم در بلور) باید از نظر شکل یکسان باشند. این به آن معناست که اگر تابع $\Psi(\mathbf{r}_l)$ با رفتن از نقطهٔ شبکه‌ای nام به نقطهٔ شبکه‌ای $(n+۱)$ ام در هر جهتی با یک ضریب A تغییر کند، باید در رفتن از نقطهٔ شبکه‌ای $(n+۱)$ ام به نقطهٔ شبکه‌ای $(n+۲)$ ام در همان جهت با همین ضریب تغییر کند. این موضوع برای یک مثال دو بعدی در شکل ۱۱-۹ نشان داده شده است، که در آن فرض می‌کنیم $\Psi(\mathbf{r}_l)$ در مبداء برابر واحد است و برای تغییر مکان توسط بردار شبکهٔ بسیط $\mathbf{a}$ با یک ضریب $\mathbf{A}$ و برای تغییر مکان توسط بردار شبکهٔ بسیط $\mathbf{b}$ با یک ضریب B تغییر کند. نتیجه می‌شود که برای یک تغییر مکان عمومی $\mathbf{r}_l=u\mathbf{a}+v\mathbf{b}$ داریم

$$\Psi(\mathbf{r}_l)=A^u B^v$$

مگر اینکه A و B را چنان برگزینیم که $|A|=|B|=۱$، یک وضعیت غیرفیزیکی خواهیم داشت که در آن $\Psi(\mathbf{r}_l)$ به طور نامحدود در برخی از جهتها افزایش می‌یابد. بنابراین می‌توانیم قرار دهیم

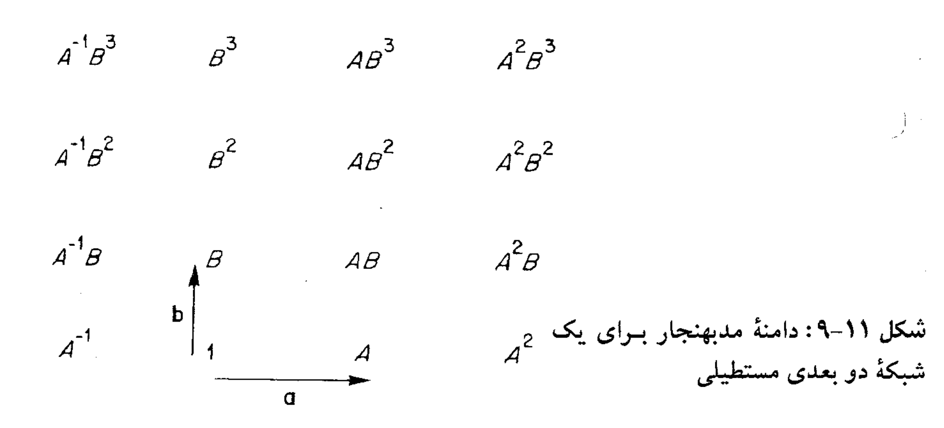
$$A=e^{i\theta} \qquad B=e^{i\phi}$$

جوابهای عمومی‌تر در نزدیکی یک مرز، ولی نه در یک بلور نامتناهی قابل قبولند. بنابراین داریم

$$\Psi(\mathbf{r}_l)=e^{i(u\Theta+v\phi)}$$

اگر بردار $\mathbf{k}$ را چنان **تعریف کنیم** که $\mathbf{k.a}=\theta$ و $\mathbf{k.b}=\phi$، آن گاه

$$\Psi=(\mathbf{r}_l,t)=\psi(\mathbf{r}_l)e^{-i\omega t}=e^{i\mathbf{k}.(u\mathbf{a}+v\mathbf{b})}e^{-i\omega T}=e^{i(\mathbf{k}.\mathbf{r}_l-\omega t)} \tag{۲۶-۱۱}$$



شکل ۱۱-۹: دامنهٔ مدبهنجار برای یک شبکهٔ دو بعدی مستطیلی

بنابراین طبیعت موج‌گونهٔ این جواب پیامدی از تقارن انتقالی شبکه است.

حال باید این نتیجه را به موردی که در آن بیش از یک اتم در هر یاختهٔ یکّهٔ بسیط وجود دارد تعمیم دهیم. قبلاً یک وضعیت عمومی‌تر تحت عنوان ارتعاشات زنجیر خطی شامل دو نوع اتم در بخش ۲-۳-۲ مورد ملاحظه قرارگرفته است. در آنجا دو نوع معادلهٔ حرکت داشتیم، یکی برای هر نوع اتم، و جواب توسط نسبت $\alpha(\mathbf{k})$ مشخص شد، که تغییر مکانهای نسبی دو اتم در هر یاخته را، همراه با یک ضریب موج گونه معادل با ضریب مربوط به معادلهٔ (۱۱-۲۶) ارائه کرد. برای هر مقدار $\mathbf{k}$ دو مقدار ممکن $\alpha(\mathbf{k})$ و در نتیجه دو بسامد متفاوت مد بهنجار $\omega(\mathbf{k})$ وجود داشتند. این نتیجه به آسانی به مورد s اتم در هر یاخته یکّهٔ بسیط تعمیم داده می‌شود، s نوع متمایز معادلهٔ حرکت وجود خواهد داشت؛ برای مشخص کردن تغییر مکان نسبی اتمها در یاختهٔ یکّه، برای هر مد بهنجار، تعداد s-۱ نسبت $\alpha_۲(\mathbf{k})$ ، ... ، $\alpha_s(\mathbf{k})$ لازم خواهد بود؛ برای هر مقدار $\mathbf{k}$، s مد بهنجار و بنابراین s شاخهٔ رابطهٔ پاشندگی $\omega(\mathbf{k})$ وجود خواهد داشت. این استدلال مخصوص ارتعاشات شبکه نیست و در مورد هر وضعیتی که در آن باید دامنه‌ای در s نقطهٔ درون یاختهٔ یکّهٔ بسیط تعریف شود به کار می‌رود.

حال مانند فصل ۴، موردی را که $\Psi(\mathbf{r},t)$ تابع موج یک الکترون است و باید در تمامی نقاط فضا تعریف شود، در نظر می‌گیریم. با اختیار حد $s \to \infty$ در بحث بالا، می‌توان تعمیم مناسب معادلهٔ ۱۱-۲۶ را برای این مورد به دست آورد. با این کار تعداد، نامتناهی از شاخه‌های $\omega(\mathbf{k})$ مربوط به تعدادی نامتناهی از نوارهای انرژی برای الکترونها به بار می‌آید؛ خوشبختانه فقط شمار کوچکی از این شاخه‌ها مهم خواهند بود. در حد $s \to \infty$ ، مجموعهٔ اعداد $\alpha_۲$ ، ... ، α_s به یک تابع پیوستهٔ $u(r)$ که در تمامی نقاط درون یک یاختهٔ یکّه تعریف می‌شود می‌گراید؛ این

مقادیر $u(\mathbf{r})$ مانند مقادیر $\alpha_۲$، ...، α_s در درون یاختهٔ بعدی تکرار می‌شوند. در نتیجه $u(\mathbf{r})$ تابعی دوره‌ای با دورهٔ شبکه است. بنابراین تعمیم مناسب معادلهٔ (۱۱-۲۶) چنین است

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \frac{۱}{\sqrt{V}}\, u_k(\mathbf{r})\, e^{i(\mathbf{k}.\mathbf{r} - \omega t)} \qquad (۱۱\text{-}۲۷)$$

که در آن پسوند $\mathbf{k}$ را اضافه کرده‌ایم تا نشان دهیم که شکل تابع $u(\mathbf{r})$ به $\mathbf{k}$ بستگی دارد؛ این تابع برای هر شاخهٔ طیف بسامدی نیز متفاوت است. به تناسب یک عامل بهنجارش $۱/\sqrt{V}$ در معادلهٔ (۱۱-۲۷) نوشته‌ایم، که در آن V حجم بلور است (معادلهٔ(۳-۳) را ببینید). تابع موج (۱۱-۲۷) به **تابع موج بلوخ** معروف است و این حقیقت که توابع موج درون بلور را می‌توان به این شکل بیان کرد **قضیهٔ بلوخ** است.

۱۱-٤ مدهای بهنجار و شبکهٔ وارون

۱۱-۴-۱ دوره‌ای بودن رابطهٔ پاشندگی

در این قسمت این نتیجهٔ مهم را به دست می‌آوریم که یک ***مد بهنجار بلور که توسط تابعی به شکل معادلهٔ (۱۱-۲۶) یا (۱۱-۲۷) برای یک بردار موج $\mathbf{k}$ توصیف می‌شود، را می‌توان با تابعی به همین شکل ولی با یک بردار موج متفاوت $\mathbf{k}'$ نیز توصیف کرد، $\mathbf{k}'$ با $\mathbf{k}$ چنین مربوط می‌شود***

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}_۰ \qquad (۱۱\text{-}۲۸)$$

که در آن $\mathbf{G}_۰$ هر بردار شبکهٔ وارون بلور است که توسط معادلهٔ (۱۱-۷) بیان شده است، تثبیت این نتیجه برای معادلهٔ (۱۱-۲۶)، که در آن تابع Ψ فقط در نقاط شبکه تعریف می‌شود، آسان است. از معادلهٔ (۱-۲) داریم $\mathbf{r}_l = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + \omega\mathbf{c}$، به طوری که با به کار بردن معادلات (۱۱-۷) و (۱۱-۹)، در می‌یابیم که $\mathbf{G}_۰.\mathbf{r}_l = ۲\pi(uh + vk + \omega l)$ بنابراین

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k}'.\mathbf{r}_l} &= e^{i\mathbf{G}_۰.\mathbf{r}_l}\, e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}_l} \\ &= e^{i۲\pi(uh + vk + \omega l)}\, e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}_l} \\ &= ۱\times e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}_l} \end{aligned}$$

و با جایگذاری $\mathbf{k} \to \mathbf{k}'$ معادلهٔ (۱۱-۲۶) تغییری نمی‌یابد.

این نتیجه را می‌توان به توابع معادلهٔ (۱۱-۲۷)، که در تمام مکانها تعریف می‌شوند، تعمیم داد. از آنجا که این تعمیم جبر پیچیده‌تر و مفاهیم جدیدی را در بردارد، نخست اهمیت این نتیجه را با اشاره به برخی از پیامدهایش نشان خواهیم داد:

(۱) از آنجا که هر $\mathbf{k}'$ که معادلهٔ (۱۱-۲۸) را ارضا کند حرکتهای یکسانی را بیان می‌کند،

نتیجه می‌شود که برای تمام چنین بردارهای موج، بسامد مد یکسان است و بنابراین ***برای هر شاخهٔ رابطهٔ پاشندگی بسامد در فضای k با همان دورهٔ شبکهٔ وارون دوره‌ای است.*** قبلاً با چنین نتیجه‌ای برای ارتعاشات شبکه و حالتهای الکترونی زنجیر یک بعدی رو به رو شده‌ایم (بخشهای ۲-۳-۱ ، ۲-۳-۲ و ۴-۳-۲)، که در آنها به این نتیجه رسیدیم که روابط پاشندگی باید در فضای $\mathbf{k}$ با دورهٔ $2\pi/a$ دوره‌ای باشد. $2\pi/a$ فاصلهٔ تکرار شبکهٔ وارون برای یک شبکهٔ فضایی حقیقی یک بعدی با فاصلهٔ شبکه a است.

(۲) قابلیت انعطاف در مورد مجاز بودن افزایش هر بردار شبکهٔ وارون به بردار موج به کار رفته در نمایش یک مد بهنجار به این معنا است که ***هر مد را می‌توان توسط بردار موجی درون یک تک یاختهٔ یکّهٔ بسیط از شبکهٔ وارون نمایش داد:*** معادلهٔ (۱۱-۲۸) هر بردار موج $\mathbf{k}$ خارج از این یاخته را توسط یک بردار $G_\circ$ شبکهٔ وارون که به طور مناسب برگزیده می‌شود به $\mathbf{k'}$ در داخل یاخته مربوط می‌کند. در محاسبات یک بعدی در بخشهای ۲-۳ و ۴-۳-۳ دیدیم که تمام ارتعاشات شبکه‌ای و تمام حالتهای الکترونی‌ای که از نظر فیزیکی متمایزند توسط بردارهای موج درون یک گسترهٔ $2\pi/a$ نمایش داده می‌شوند، $2\pi/a$ اندازهٔ یاختهٔ بسیط در شبکهٔ وارون است. در بخش بعد با استفاده از نتایج (۱) و (۲)، طرحهای منطقه‌ای گسترده و تحویل‌یافته و تکراری ۴-۹ را به بیش از یک بعد تعمیم می‌دهیم

(۳) ***تعداد مدهای بهنجار وابسته به هر شاخهٔ رابطهٔ پاشندگی برابر با تعداد N_c ی یاخته‌های یکّهٔ بسیط در بلور است.*** برای شرایط مرزی دوره‌ای که با امواج متحرک به شکل معادلات (۱۱-۲۶) و (۱۱-۲۷) سازگارند، قبلاً نشان داده‌ایم که بردارهای $\mathbf{k}$ ی ممکن با چگالی $V/(2\pi)^3$ به طور یکنواخت در فضای $\mathbf{k}$ توزیع می‌شوند (معادلهٔ (۲-۴۱))، که در آن V حجم بلور است. هر مد متمایز توسط یک بردار $\mathbf{k}$ در درون یک یاختهٔ بسیط شبکهٔ وارون با حجم $a^*.(b^*\times c^*)$ نمایش داده می‌شود؛ با کاربرد معادلهٔ (۱۱-۹)، این حجم را می‌توان برابر با $(2\pi)^3/[\mathbf{a}.(\mathbf{b}\times\mathbf{c})]=(2\pi)^3/v_c$ نوشت، که در آن v_c حجم یاختهٔ یکّهٔ بسیط شبکهٔ فضای مستقیم است. بنابراین شمار مقادیر $\mathbf{k}$ برای هر شاخهٔ رابطه پاشندگی به صورت زیر است.

$$\frac{V}{(2\pi)^3}\,\frac{(2\pi)^3}{v_c}=\frac{V}{v_c}=N_c \qquad \textbf{(۱۱-۲۹)}$$

برای گسترش اثباتمان در مورد عبارت آغاز این بخش برای در برگرفتن توابع به شکل معادلهٔ (۱۱-۲۷)، نخست باید بسط فوریهٔ یک تابع دوره‌ای از مکان را به بیش از یک بعد تعمیم دهیم. با ملاحظهٔ بسط یک بعدی به روشی متفاوت با روشی که معمولاً به کار می‌رود شروع کنیم. اگر تابعی از x دارای دورهٔ a باشد می‌توان شبکه‌ای با فاصلهٔ تکرار به آن مربوط کرد؛ این تابع وقتی از نقاطی به فاصلهٔ a از هم مشاهده شود، یکسان به نظر می‌رسد. توابع پایهٔ بسط سری فوریه

همگی به صورت توابع سینوسی و کسینوسی با بسامد a اند؛ این توابع دارای شکل عمومی $cos(G_n x)$ و $sin(G_n x)$ اند که در آن،

$$G_n = 2n\pi/a \qquad (۱۱-۳۰)$$

و n عدد درستی است. نماد G_n را به کار می‌بریم زیرا معادلهٔ (۱۱-۳۰) بردارهای شبکهٔ وارون مربوط به شبکهٔ یک بعدی با فاصلهٔ تکرار a را بیان می‌کند. به جای $cos(G_n x)$ و $sin(G_n x)$ می‌توان نمایی‌های مختلط $exp(iG_n x)$ و $exp(iG_n x)$ را به کار برد، و بنابراین هر تابع را می‌توان به صورت زیر بسط داد

$$u(x) = \sum_G a_G e^{i G_n x} \qquad (۱۱-۳۱)$$

که در آن مجموعیابی روی تمامی بردارهای شبکهٔ وارون است و a_Gها ضرایب فوریه‌اند؛ توجه کنید که چون مجموعیابی روی تمامی مقادیر مثبت و منفی n است، نیازی به افزودن جملات $exp(-iG_n x)$ نداریم.

با کاربرد معادل سه بعدی معادلهٔ (۱۱-۳۱)، می‌توان تابع $u_k(\mathbf{r})$ در معادلهٔ (۱۱-۲۷) را بسط داد.

$$u_k(\mathbf{r}) = \sum_G a_G(\mathbf{k}) e^{i \mathbf{G}.\mathbf{r}} \qquad (۱۱-۳۲)$$

که در آن مجموعیابی بر روی تمامی بردارهای شبکهٔ وارون است، و $a_G(\mathbf{k})$ ضرایب فوریه‌اند. اگر معادلهٔ (۱۱-۳۲) را در معادلهٔ (۱۱-۲۷) درج کنیم و معادلهٔ (۱۱-۲۸) را برای $\mathbf{k}$ به کار بریم، نتیجه می‌گیریم

$$\Psi(\mathbf{r},\mathbf{t}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{G}} a_G(\mathbf{k}' - G_\circ) e^{i\mathbf{G}.\mathbf{r}} e^{i[(\mathbf{k}' - \mathbf{G}_\circ).\mathbf{r} - \omega t]}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_G a_G(\mathbf{k}' - G_\circ) e^{i(\mathbf{G}_\circ - \mathbf{G}_\circ).\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'.\mathbf{r} - \omega t)}$$

اختلاف $\mathbf{G}' = \mathbf{G} - \mathbf{G}_\circ$ نیز یک بردار شبکهٔ وارون است و چون مجموعیابی روی ***تمامی*** بردارهای شبکهٔ وارون است، می‌توان آن را به صورت یک مجموعیابی بر روی $\mathbf{G}'$ نوشت، یعنی

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{G}'} a_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}' - \mathbf{G}_\circ) e^{i\mathbf{G}'.\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'.\mathbf{r} - \omega t)}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{G}'} b_{\mathbf{G}'}(\mathbf{k}') e^{i\mathbf{G}'.\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'.\mathbf{r} - \omega t)}$$

که در آن با قرار دادن $(\mathbf{k}')\ b_{G'}$ به جای $a_G(\mathbf{k}'-\mathbf{G}_\circ)$ برچسب‌زنی مجدد ضرایب فوریه را نشان می‌دهد. بنابراین $\Psi(\mathbf{r},t)$ بازهم به شکل معادلهٔ (۱۱–۲۷) است، یعنی

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\times(\text{تابع مکان با دورهٔ شبکه فضای حقیقی})\times e^{i(\mathbf{k}'.\mathbf{r}-\omega t)}$$

به جز اینکه این تابع به جای $\mathbf{k}$ با بردار موج $\mathbf{k}'$ نمایش داده شده است.

برای تغییر بردار $\mathbf{k}$ که برای نمایش تابع موج الکترون آزاد در معادلهٔ (۳–۳) به کار رفت می‌توان از معادلهٔ (۱–۲۸) که به صورت زیر بازنویسی شده است استفاده کرد

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\ e^{i(\mathbf{k}.\mathbf{r}-\omega t)}=\frac{1}{\sqrt{V}}\ e^{i\mathbf{G}_\circ.\mathbf{r}}\ e^{i(\mathbf{k}'.\mathbf{r}-\omega t)}$$

چون $exp\ (-i\mathbf{G}_\circ.\mathbf{r})$ دارای دورهٔ شبکهٔ بلور است، تابع موج بازنویسی شده به شکل معادلهٔ (۱۱–۲۷) است. این کار منطقی نیست زیرا یک انتخاب بدیهی برای $\mathbf{k}$ که باید برای تابع موج الکترون آزاد به‌کار رود وجود دارد. وقتی اثر پتانسیل دوره‌ای شبکه وارد می‌شود، عمدتاً دیگر یک انتخاب بدیهی برای $\mathbf{k}$ وجود ندارد. و آزادی انتخاب این که کدام یاختهٔ یکّهٔ بسیط شبکهٔ وارون را به‌کار بریم بسیار مفید می‌شود. در بخش بعد در مورد انتخابهای ممکن متفاوت بحث می‌کنیم.

۱۱–۴–۲ مناطق بریلوئن و ترسیم روابط پاشندگی

در ترسیم روابط پاشندگی یک بعدی الکترون در فصل ۴ تفکیک فضای $\mathbf{k}$ به مناطق بریلوئن، با مرزهایی در مقادیری از $\mathbf{k}$ که برای پراش براگ موج الکترون رخ می‌دهد، را مفید یافتیم. پراش، در مرزهای منطقهٔ بریلوئن به جای امواج متحرک امواج ایستاده تولید می‌کند، که پیامد آن صفر شدن سرعت گروه مدهای بهنجار موج گونه است. گافهای انرژی، که توسط یک پتانسیل دوره‌ای شبکه تولید می‌شوند، در منحنی پاشندگی الکترون آزاد در مرزهای منطقهٔ بریلوئن نیز پدیدار می‌شوند. در یک بلور یک بعدی مرزهای منطقهٔ nام برحسب فاصلهٔ شبکه‌ای a چنین بیان می‌شوند.

$$(n-1)\pi/a<|k|<n\pi/a$$

و هر منطقه شامل دو ناحیه است که هر ناحیه با پهنای π/a به طور متقارن حول مبداء قرار دارد (شکل ۴–۲ را ببینید). منطقهٔ اول نقش ویژه‌ای ایفا می‌کند، زیرا یک یاختهٔ یکهٔ بسیط شبکهٔ وارون است[1] و یاختهٔ یکه‌ای است که معمولاً منحنی‌های پاشندگی مربوط به شاخه‌های

۱– توجه کنید که نقطهٔ شبکه در وسط یاخته است، نه درگوشهٔ آن.

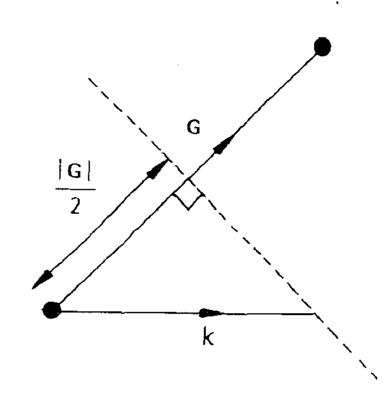
مختلف پاشندگی در آن ترسیم می‌شوند. (مانند شکل ۴-۹ (ب)).

اکنون مفهوم منطقهٔ بریلوئن را به دو و سه بعد گسترش می‌دهیم و مانسته‌های اکثر خواص بیان شده در بند قبل را به دست می‌آوریم. با وجودی که بحث ما در بارهٔ حالتهای الکترونی بلور است، آن را می‌توان به خوبی در مورد دیگر مدهای بهنجار موج گونه نیز به کار برد. مرزهای منطقهٔ بریلوئن را چنان اختیار می‌کنیم که توسط بردارهای موج $\mathbf{k}$ که شرط پراش، معادلهٔ (۱۱-۸)، را ارضا می‌کنند بیان شوند؛ برای مشخص کردن این بردارها این معادله را به صورت $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}$ می‌نویسیم، که با مجذور کردن دو طرف این معادله داریم $k'^2 = k^2 + 2\mathbf{k}.\mathbf{G} + G^2$. به یاد داشته باشید که $k'^2 = k^2$ بنابراین $2\mathbf{k}.\mathbf{G} = -G^2$؛ اگر $\mathbf{G}$ یک بردار شبکهٔ وارون باشد $\mathbf{-G}$ نیز چنین است و این به ما اجازه می‌دهد تا علامت منها را در این معادله تغییر دهیم و شرط وقوع پراش که $\mathbf{k}$ باید ارضاء کند را چنین بنویسیم

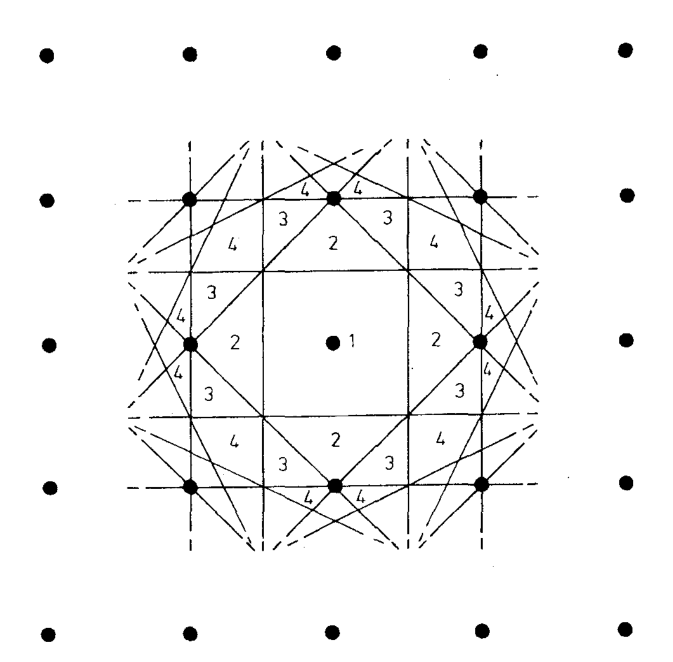
$$2\mathbf{k}.\mathbf{G} = G^2 \qquad (۱۱\text{-}۳۳)$$

که در آن $\mathbf{G}$ هر بردار شبکهٔ وارون است.

مقادیر $\mathbf{k}$ که این معادله را ارضا می‌کند تعبیر هندسی ساده‌ای دارند که در شکل (۱۱-۱۰) نشان داده شده است؛ این بردارها در صفحهٔ عمود منصف بردار شبکهٔ وارون $\mathbf{G}$ قرار می‌گیرند. به این ترتیب، مرزهای منطقهٔ بریلوئن برای یک شبکهٔ دو بعدی مربعی نظیر آن است که در شکل ۱۱-۱۱ نشان داده شده است. مناطق متوالی با شماره‌گذاری مشخص شده‌اند؛ همانند حالت یک بعدی، منطقهٔ nام را طوری در نظر می‌گیریم که آن نواحی‌ای از فضای $\mathbf{k}$ را در برگیرد که از مبداء با عبور از حداقل $n-1$ مرز منطقه بتوان به آنها رسید. برخلاف مورد یک بعدی، مناطق بالاتر به طور فزاینده‌ای تکه تکه می‌شوند. ولی منطقهٔ اول بریلوئن همواره پیوسته است؛ این منطقه به گونه‌ای که ساخته می‌شود مکان هندسی نقاطی است که به مبداء نزدیکتر از



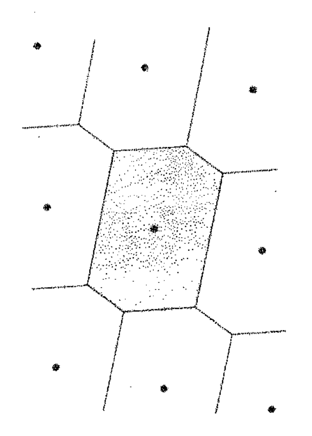
شکل ۱۱-۱۰: تعبیر هندسی معادلهٔ (۱۱-۳۳). اگر $\mathbf{k}$ بر روی صفحهٔ عمود منصف $\mathbf{G}$ قرار گیرد، آنگاه مؤلفهٔ k در راستای $\mathbf{G}$ عبارت است از $\mathbf{k}.\mathbf{G} / |\mathbf{G}| = |\mathbf{G}| / 2$؛ بنابراین $2\mathbf{k}.\mathbf{G} = G^2$



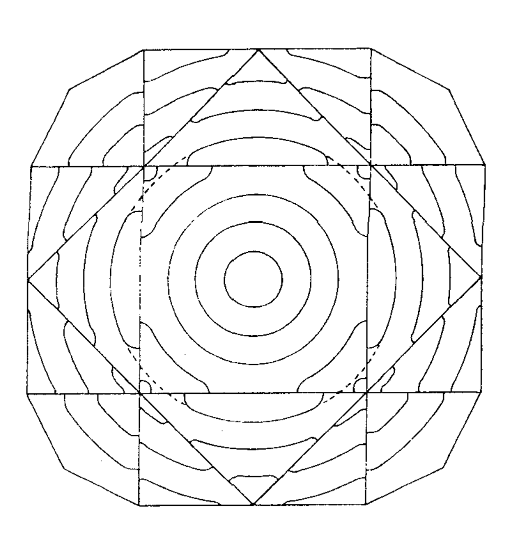
شکل ۱۱-۱۱: مرزهای منطقهٔ بریلوئن برای یک شبکهٔ وارون مربعی سادهٔ دو بعدی. مرزها عمود منصف‌های بردارهای شبکهٔ وارون آن دسته از نقاط شبکه‌اند که در شکل نشان داده شده‌اند. شماره‌گذاری مناطق بریلوئن متوالی توسط شمارش تعداد مرزهای منطقهٔ قطع شده، برای پیمودن فاصلهٔ از مبداء تا این مناطق، حاصل می‌شود.

هر نقطهٔ شبکه دیگری هستند. به این ترتیب این منطقهٔ چند وجهی هم‌آرایی یک نقطهٔ شبکه وارون است، یعنی یاختهٔ یکّهٔ ویگنر - سایتس شبکهٔ وارون. شکل ۱۱-۱۲ نشان می‌دهد که چگونه یاخته‌های ویگنر - سایتس شبکهٔ وارون دو بعدی عام برای پر کردن فضا پهلوی هم چیده می‌شوند. مانند حالت یک بعدی، منطقه اول بریلوئن است که برای رسم روابط پاشندگی به منزلهٔ منطقهٔ "ویژه" شناخته می‌شود.

برای نمایش طرحهای ترسیمی متفاوت روابط پاشندگی، منحنیهای پیش‌بینی شده توسط نظریهٔ الکترون تقریباً آزاد را برای شبکهٔ وارون دو بعدی، شکل ۱۱-۱۱، بررسی می‌کنیم. شکل ۱۱-۱۳، پربندهای انرژی ثابت را که روی ساختار منطقهٔ بریلوئن نهاده شده‌اند نشان می‌دهد؛ این منحنیها توسط واپیچش اندک منحنی‌های الکترون آزاد، به منظور اطمینان از این که پربندها مرزهای منطقه را در زوایای قائمه قطع می‌کنند، به دست آمده‌اند، به این ترتیب تضمین



شکل ۱۱-۱۲: منطقهٔ اول بریلوئن (سایه زده شده) یاختهٔ یکهٔ ویگنر-ساتیس شبکهٔ وارون است.



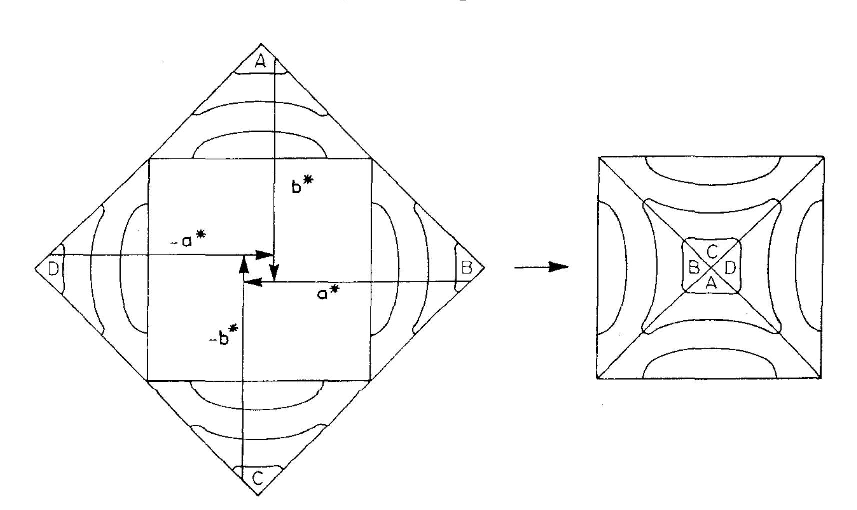
شکل ۱۱-۱۳: پربندهای با انرژی الکترونی یکسان که روی مرزهای منطقه‌های بریلوئن در شکل ۱۱-۱۱ نهاده شده شده‌اند. مناطق اول، دوم، سوم و بخشی از منطقهٔ چهارم نشان داده شده‌اند. این پربندها با واپیچش اندک دایره‌های الکترون آزاد برای به دست آوردن تقاطع عمود بر مرز منطقه حاصل می‌شوند. منحنی نقطه چین یک دایرهٔ ناواپیچیده را نشان می‌دهد.

می‌شود که مؤلفهٔ سرعت گروه عمود بر مرز منطقه صفر شود. از مقایسه با شکل ۴-۹ در می‌یابیم که شکل ۱۱-۱۳ تعمیم طرح منطقهٔ گسترده به دو بعد است؛ مناطق متوالی بعدی نوارهای انرژی بالاتر متوالی را در بردارند. دو مشکل در رابطه با این طرح ترسیمی بروز می‌کند. نخست، تکه‌تکه شدن مناطق بالاتر مشاهدهٔ اینکه در نوارهای انرژی بالاتر چه می‌گذرد را مشکل‌می‌سازد. دوم، فقط برای مدل الکترون تقریباً آزاد است که می‌توان با این روش، یک

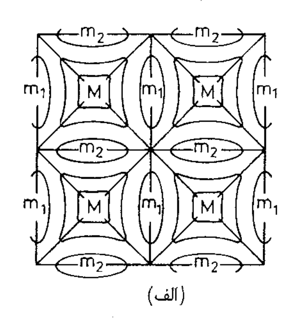
منطقهٔ به خصوص را با یک نوار انرژی به خصوص مشخص کرد؛ در این مدل حالتهای الکترون توسط نظریهٔ اختلال از حالتهای الکترون آزاد به دست می‌آیند و برای مشخص کردن منطقه بریلوئن مناسب با حالت الکترونی، بردار **k** ی الکترون آزاد را می‌توان به کار برد.

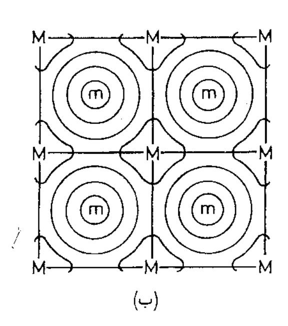
برای غلبه بر این مشکلات می‌توان طرح منطقهٔ تحویل یافته را به کار برد که در آن رابطهٔ پاشندگی تمام نوارهای انرژی در منطقهٔ اول بریلوئن رسم شده است. پایین‌ترین نوار انرژی در شکل ۱۱-۱۳ قبلاً در این منطقه رسم شده است. شکل ۱۱-۱۴ نشان می‌دهد که چگونه پربندهای الکترونی از منطقهٔ دوم را می‌توان با انتقال به اندازه بردارهای شبکهٔ وارون نشان داده شده، در منطقهٔ اول بار نگاشت؛ توجیه این شگرد در بخش قبل ارائه شده است. پیوستگی پربندهای حاصل تضمین می‌شود؛ زیرا حالتهایی که در این طرح مجاور هم قرار می‌گیرند در طرح منطقهٔ گستردهٔ اصلی از هم به اندازهٔ یک بردار شبکهٔ وارون جدا هستند و در نتیجه یک حالت‌اند. با مقایسه با دایره‌های الکترون آزاد اولیه در شکل ۱۱-۱۳ می‌بینیم که برای این نوار بیشینهٔ انرژی در مرکز منطقه وجود دارد.

چون روابط پاشندگی با دورهٔ شبکهٔ وارون دوره‌ای‌اند می‌توانیم برای هر نوار پربندها را در سرتاسر فضای **k** ادامه دهیم تا همان طور که در شکل ۱۱-۱۵ نشان داده شده است طرح منطقهٔ تکراری برای دو نوار اول را به دست آوریم. نقاطی از شکل ۱۱-۱۵ (الف) که برچسب M دارند. بیشینه‌های انرژی‌اند، و چون به اندازهٔ بردارهای شبکهٔ وارون از هم فاصله دارند، همگی متناظر با یک حالت‌اند؛ این موضوع در مورد بیشینه‌های با برچسب M در شکل ۱۱-۱۵ (ب) نیز حقیقت دارد. نقاط با برچسب m در شکل ۱۱-۱۵ (ب) کمینه‌های انرژی متناظر با یک



شکل ۱۱-۱۴ : باز نگاشت پربندهای انرژی از منطقهٔ دوم بریلوئن به منطقه اول با انتقال به اندازهٔ بردارهای شبکهٔ وارون نشان داده شده است.





شکل ۱۱-۱۵: نمایش طرح منطقهٔ تکراری (الف) پایین‌ترین نوار انرژی مدل الکترون آزاد و (ب) نوار انرژی مدل الکترون آزاد و (ب) نوار انرژی بعد از پایین‌ترین نوار انرژی مدل الکترون آزاد مربوط به شکل ۱۱-۱۳. برچسب‌های M و m به ترتیب بیشینه‌ها و کمینه‌های انرژی را نشان می‌دهند.

حالت‌اند؛ نقاط با برچسب $m_۲$ متناظر با حالت متفاوتی هستند که با حالت نقاط با برچسب $m_۱$ تبهگن است، این تبهگنی به دلیل تقارن شبکه حاصل می‌شود. در می‌یابیم که اطلاعات بسیار زیادی در مورد شکل احتمالی منحنی‌های پاشندگی را می‌توان از تقارن شبکهٔ وارون کسب کرد. نگرش ما در این بخش عمدتاً دو بعدی است، ولی در فصل ۱۳ نشان می‌دهیم که این نگرش را می‌توان برای پیش‌بینی شکلهای احتمالی سطح فرمی فلزات سه بعدی واقعی گسترش داد.

تا اینجا فقط آثار شبکهٔ وارون بر روی روابط پاشندگی را در نظر گرفته‌ایم. برای ساختارهای بلوری‌ای که در آنها به هر نقطهٔ شبکهٔ فضای حقیقی پایه‌ای با بیش از یک اتم وابسته است، در بخش ۱۱-۲-۴ دیدیم که عامل ساختار تأثیر زیادی بر شدت باریکه‌های پراشیده داشت؛ به ویژه اگر پایه شامل دو اتم از نظر شیمیایی یکسان باشد، شدت باریکه‌های وابسته به برخی از بردارهای شبکهٔ وارون می‌تواند بی‌اندازه کوچک شود. ضعف پراش براگ امواج الکترون وابسته به برخی از بردارهای شبکهٔ وارون باعث پیدایش یک گاف انرژی بسیار کوچک روی مرز منطقهٔ بریلوئن متناظر می‌شود. به این ترتیب، برای مثال، گاف انرژی در مرز منطقهٔ بریلوئن متناظر با بردار شبکهٔ وارون (۰۰۱) در یک فلز hcp بسیار کوچک خواهد بود.

مسایل ۱۱

۱-۱۱ مکانیک نیوتونی را در مورد پراکندگی کشسان یک جسم سبک توسط یک جسم سنگین ساکن به‌کار برید و نشان دهید که تغییر اندازه حرکت جسم سبک می‌تواند بزرگ باشد، در حالی که تغییر انرژی آن قابل چشم‌پوشی است.

۲-۱۱ نشان دهید که شبکهٔ وارون شبکهٔ وارون، دوباره شبکهٔ فضایی واقعی را به بار می‌آورد.

۱۱-۳ چهار مقدار ممکن $|S|^2$ را محاسبه کنید، که در آن S عامل ساختار معادلهٔ (۱۱-۲۲) برای ساختار hcp است.

۱۱-۴ شرایطی راکه توسط h، k و l برای پراش از یک ساختار bcc، به هنگام استفاده از یاختهٔ یکّهٔ مکعبی قراردادی برای برچسب زدن باریکه‌ها، باید ارضاء شود به دست آورید. نشان دهید که این شرایط شبکهٔ وارون مکعبی سادهٔ یاختهٔ قراردادی را به شبکهٔ وارون fcc ی یاختهٔ بسیط برمی‌گرداند.

۱۱-۵ با استفاده از بردارهای انتقال بسیط شبکهٔ وارون که توسط معادلهٔ (۱۱-۱۶) بیان می‌شوند، باریکه‌های پراشیده از یک ساختار تنک پکیدهٔ مکعبی به صورت (۱۰۰) ($\bar{1}$۰۰)، (۱۱۱)، ($\bar{1}$۱۱)، (۱۱۰) و ($\bar{1}$۱۰) برچسب زده می‌شوند. اگر یاختهٔ یکّهٔ مکعبی قراردادی به کار رود برچسب‌های این باریکه‌ها را به دست آورید. مقادیر $a(\sin\theta)/\lambda$ را برای این باریکه‌ها محاسبه کنید، که در آن a یال یاختهٔ قراردادی است. در مورد شایستگی‌های نسبی این دو نوع سیستم برچسب‌زنی بحث کنید.

۱۱-۶ عامل ساختار را برای ساختار $Cs\,Cl$ (شکل ۱-۱۴) محاسبه کنید.

۱۱-۷ تابش $Mo\ K_\alpha$ که برای کسب داده‌های مربوط به شکل ۱۱-۷ به کار می‌رود دارای طول موج ۰/۷۱۳ Å است. طول یال یاختهٔ یکّهٔ مکعبی قراردادی آلومینیوم را با استفاده از شکل به دست آورید.

۱۱-۸ نشان دهید که چگونه می‌توان مناطق سوم و چهارم بریلوئن در شکل ۱۱-۱۱ را توسط انتقال به اندازهٔ بردارهای شبکه وارون مناسب در منطقهٔ اول رسم کرد. پربندهای انرژی الکترون تقریباً آزاد وقتی از منطقهٔ سوم به منطقهٔ اول انتقال داده می‌شوند را رسم کنید. بیشینه‌ها و کمینه‌ها را مشخص کنید.

۱۱-۹ نسبت k_F/k_m را برای فلزات یک ظرفیتی با ساختارهای bcc و fcc محاسبه کنید، k_F عدد موج فرمی الکترون آزاد و k_m فاصلهٔ کمینه در فضای k از مبداء تا مرز منطقهٔ اول بریلوئن است. رابطهٔ بین نتایجی که به دست آوردید با سطوح فرمی سدیم (bcc) و مس (fcc) چیست؟

در بارهٔ این چالش تجربی و فراهم آمدن امکانات جدید بسیار برانگیخته شدیم. شگفت آنکه برای ما دو هفته‌ای طول کشید تا درک کنیم که، نه فقط یک کاوشگر طیف‌سنجی موضعی داریم، بلکه روبش، تصویرهای طیف‌سنجی و توپوگرافی نیز به بار می‌آورد، یعنی یک میکروسکوپ جدید داریم. -گرد بینیگ و هینرش روهر - در مورد کشف میکروسکوپ روبشی تونلی - سخنرانی به هنگام دریافت جایزهٔ نوبل، ۱۹۸۶



پراکندگی نوترونها و الکترونها از جامدها

۱۲-۱ مقدمه

در بخش ۱۱-۲ رهیافت عام به مسئلهٔ پراکندگی امواج توسط بلورها را ارائه کردیم و نشان دادیم که اندازه‌گیریهای جهتها و شدتهای باریکه‌های پراشیده چگونه تعیین ساختار را ممکن می‌سازد[۱]. ترتیب تجربی به کار برده شده در پراش پرتو X قبلاً در فصل ۱ توصیف شده است. در این فصل روشهایی را که برای مطالعهٔ پراکندگی نوترونها و الکترونها به کار می‌روند شرح می‌دهیم. توضیح می‌دهیم که چگونه می‌توان از پراکندگی ناکشسان نوترونها برای تهیهٔ اطلاعات در مورد رابطهٔ انرژی - اندازه حرکت برای برانگیختگیها در یک جامد، مانند فونونها و مگنونها، استفاده کرد. سرانجام در بخش ۱۲-۶ گزارش مختصری از تعدادی از شگردهای مهم برای بررسی سطوح جامد، که در اکثر آنها از الکترونها استفاده می‌شود، ارائه می‌کنیم.

۱- واژهٔ *پراکندگی* را برای هر دو فرایند کشسان و ناکشسان به کار می‌بریم. واژهٔ *پراش* را در مورد پراکندگی کشسان از یک ساختار منظم برمی‌گزینیم.

۱۲-۲ مقایسه پرتوهای X، نوترونها و الکترونها

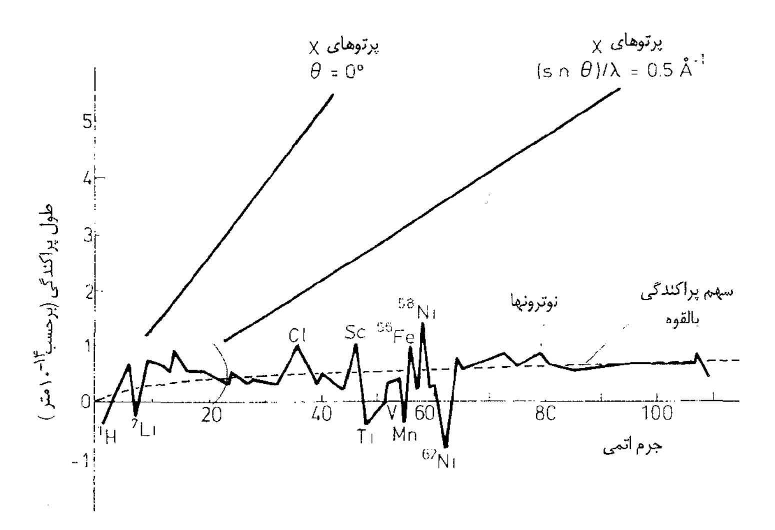
۱۲-۲-۱ برهم کنش پرتوهای X، نوترونها و الکترونها با اتمها

تفاوتهای مهمی در نحوهٔ برهم کنش هر یک از پرتوهای X، نوترونها و الکترونها با یک جامد وجود دارد. پرتوهای X عمدتاً توسط الکترونهای اتمی پراکنده می‌شوند، و بنابراین عامل پراکندگی اتمی f (معادلهٔ (۱۱-۱) را ببینید)، که شدت پراکندگی را توصیف می‌کند با افزایش عدد اتمی به طور هموار افزایش می‌یابد (شکل ۱۲-۱)؛ این باعث می‌شود که آشکارسازی اتمهای سبک توسط پرتوهای X خصوصاً در جامدهایی که در آنها اتمهای بسیار سنگین‌تری نیز وجود دارند به سختی صورت گیرد. به دلیل تداخل ویرانگر بین تابش پراکنده شده توسط قسمتهای مختلف ابر الکترونی، f با افزایش زاویهٔ پراکندگی نیز کاهش می‌یابد (مسئلهٔ ۱۲-۱).

نوترونها به دو طریق با اتمها برهم کنش می‌کنند. آنها در اثر نیروی هسته‌ای قوی، توسط هسته‌ها پراکنده می‌شوند و قدرت این پراکندگی به تناسب توسط **طول پراکندگی** b نمایش داده می‌شود به طوری که سطح مقطع کل برای پراکندگی $4\pi b^2$ است؛ موج پراکنده شده به شکل معادلهٔ ۱۱-۱ است که در آن b به جای f قرار گرفته است. همان طور که در شکل ۱۲-۱ مشاهده می‌شود طول پراکندگی به طور تکنوا با عدد اتمی افزایش نمی‌یابد؛ بنابراین برای تعیین ساختار جامدهایی که دارای عناصر سبک (به ویژه هیدروژن)اند و برای تمایز عناصر با عدد اتمی مشابه از یکدیگر، نوترونها مفیدتر از پرتوهای X اند. هسته چون از طول موج نوترون بسیار کوچک‌تر است به منزلهٔ یک پراکنندهٔ نقطه‌ای عمل می‌کند و طول پراکندگی با افزایش زاویهٔ پراکندگی کاهش نمی‌یابد. دومین نوع برهم کنش نوترونها با اتمها، نیروی مغناطیسی بین گشتاور مغناطیسی نوترون و گشتاور مغناطیسی اتم است (به شرطی که اتم چنین گشتاور مغناطیسی داشته باشد)[1]. این نیرو به جهت گشتاور اتمی بستگی دارد و این باعث می‌شود که از پراش نوترون برای تعیین، ماهیت نظم مغناطیسی در جامدها استفاده شود (بخش ۱۲-۵).

الکترونها نیز همانند پرتوهای X، توسط الکترونهای اتمی پراکنده می‌شوند. ولی پراکندگی الکترونها بسیار قوی‌تر است، و این دو پیامد مهم دارد. نخست، یک باریکهٔ الکترونی با انرژی پایین، که برای مطالعات پراش مناسب است، با ورود به یک جامد به سرعت تضعیف می‌شود و بنابراین چنین الکترونهایی عمدتاً برای مطالعهٔ ماهیت شیمیایی و فیزیکی سطوح جامد به کار می‌روند. دوم، نظریهٔ پراکندگی سادهٔ بخش ۱۱-۲ دیگر معتبر نیست، زیرا در این نظریه فرض می‌شود که موج پراکنده شده توسط هر اتم آن قدر ضعیف است که از دامنهٔ پراکندگی مجدد توسط یک اتم دیگر می‌توان چشم‌پوشی کرد. تحلیل آزمایشهای پراکندگی الکترون به دلیل در

۱- از پراکندگی مغناطیس توسط گشتاور مغناطیسی هسته‌ای می‌توان چشم‌پوشی کرد، زیرا گشتاورهای مغناطیسی هسته‌ای نوعاً به نسبت یک ضریب ۲۰۰۰ از گشتاورهای الکترونی کوچکترند.



شکل ۱۲-۱: طول پراکندگی برای پراکندگی هسته‌ای نوترونها به صورت تابعی از عدد اتمی. منحنی شکسته متناظر است با پراکندگی توسط یک کرهٔ سخت با شعاعی برابر با شعاع هسته. تغییر بی‌قاعده حول این منحنی به پراکندگی تشدیدی مربوط می‌شود؛ تشدید وقتی رخ می‌دهد که، انرژی در فرایند پراکندگی چنان باشد که یک نوترون و یک هسته بتوانند با هم ترکیب شوند و یک هستهٔ مرکب واسط تشکیل دهند. طول پراکندگی برای پرتوهای X نیز نشان داده شده است؛ این طول به صورت تابعی از $(sin\,\theta)/\lambda$ است که در آن θ زاویهٔ پراکندگی و λ طول موج پرتو X است (مسئلهٔ ۱۲-۱). (با اجازه از انتشارات دانشگاه آکسفورد از کتاب *G. E. Bacon, Neutron Diffraction, Third Edition, 1975)* **اقتباس شده است.)**

نظر گرفتن پراکندگی چندگانه خیلی پیچیده‌تر است. چون الکترونها بار دارند، باریکه‌های الکترونی می‌توانند توسط میدانهای الکتریکی و مغناطیسی کانونی شوند؛ بنابراین برای مطالعهٔ یک ناحیهٔ جایگزیدهٔ کوچک از سطح نمونه می‌توان از الکترونها استفاده کرد.

۱۲-۲-۲ پراکندگی ناکشسان

برای استفاده از پراکندگی ناکشسان پرتوهای X، نوترونها و الکترونها در بررسی منحنی‌های پاشندگی برانگیختگی‌ها در جامدها، اندازه‌گیری تغییر انرژی (بسامد) تابش ضروری است. مشکل نسبی برای حصول چنین اندازه‌گیری را می‌توان با محاسبهٔ انرژیهای فوتونها، نوترونها و الکترونهای با طول موج ۲Å ($k = ۱۰^{۱۰}\ nm^{-۱}$) بررسی کرد. این طول موج با فاصلهٔ اتمی قابل مقایسه است و بنابراین برای بررسیهای ساختاری ایده‌ال است؛ همین طول موج برای بررسی برانگیختگی‌های قابل مقایسه با این طول موج نیز مناسب است. (چرا)؟ این

انرژیها عبارتند از :

پرتوهای X	نوترونها	الکترونها
$E=h\nu=hc/\lambda$	$E=\frac{\hbar^2\kappa^2}{2M_n}$	$E=\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m_n}$
$\simeq 5\times10^4 eV$	$\simeq 0/02\ eV$	$\simeq 40 eV$

فونونها مثالهای نوعی برانگیختگی‌های درون یک جامدند و انرژیهای تا حدود انرژی دبی دارند (بخش ۲-۶-۴)، انرژی دبی معمولاً در گسترهٔ eV۰/۱-۰/۰۱ است؛ تغییر انرژی ذره‌ای که به طور ناکشسان پراکنده شود از این مرتبه است. از مقایسه این مقدار با انرژی فرودی در می‌یابیم که تفکیک انرژی لازم برای اندازه‌گیری تغییر انرژی در مورد فوتونهای پرتو X بسیار بالاتر از نوترونها است. اگر فوتونهای با انرژی پایین‌تر به کار روند، طول موج آنها دیگر با فاصلهٔ بین اتمی قابل مقایسه نیست.

از آنچه در اینجا و در بخش قبل گفته‌ایم ممکن است تصور شود که نوترونها عموماً ابزار برتری نسبت به پرتوهای X اند. ولی چشمه‌های کوچک و ارزان پرتو X به طور وسیعی در دسترس‌اند. نوترونها یا از یک راکتور شکافت و یا توسط بمباران هدفی مناسب با الکترونها یا پروتونهای با انرژی - بالا از یک شتابدهندهٔ ذره‌ای به دست می‌آیند؛ در هر دو مورد این چشمه‌ها بزرگ و بسیار گران هستند. شدت نوترون از چنین چشمه‌هایی نیز نسبتاً پایین است (در یک راکتور نوعاً $10^{15}\ cm^{-2}s^{-1}$ است) و گسترهٔ انرژیهای نوترون وسیع است، به طوری که اغلب برای انتخاب یک نوار باریک انرژی باید شدت باز هم بیشتر کاهش یابد. در عمل در یک آزمایش پراکندگی نوترون همیشه شدت؛ به بهای از دست دادن نسبی موازی سازی و تفکیک انرژی به دست می‌آید. برعکس، برای پرتوهای X یک باریکهٔ فرودی تکفام شدید به آسانی حاصل می‌شود، زیرا خروجی لامپ پرتو X آمیزه‌ای از خطوط مشخصه و زمینهٔ پیوسته است؛ با انتخاب مناسب ولتاژ کار می‌توان قسمت بزرگی از گسیل خطی را به دست آورد. بنابراین معمولاً برای تعیین ساختار دقیق، هر جا امکان داشته باشد، از پرتوهای X استفاده می‌شود.

۱۲-۳ روشهای پراکندگی نوترون

در یک آزمایش پراکندگی نوترون عموماً به یک چشمهٔ نوترون و آشکارساز، موازی‌سازی برای تعریف جهتهای باریکه‌های فرودی و پراکنده شده و وسایلی برای تعیین انرژیهای ذرات فرودی پراکنده نیاز است. ابزار مربوط به مطالعهٔ پراکندگی نوترون به طیف‌سنج نوترون معروف است.

۱۲-۳-۱ چشمه‌های نوترون

شار پیوستهٔ نوترون را می‌توان از یک راکتور شکافت به دست آورد. برخوردهای نوترونها در درون کند کنندهٔ راکتور (نوعاً از جنس گرافیت) به آنها یک توزیع ماکسول - بولتزمن با سرعتهای

مناسب با دمایی از مرتبهٔ دمای اتاق می‌دهد؛ چنین نوترونهایی را به عنوان **نوترونهای گرمایی** توصیف می‌کنند. با وجودی که انرژی میانگین متناظر $۰/۰۲۵eV$ برای بسیاری از آزمایشهای پراکندگی خیلی مناسب است (بخش قبل را ببینید)، پهن بودن توزیع سرعت به معنای آن است که باید یک روش انتخاب انرژی در تجهیزات آزمایش گنجانده شود.

در برخی از آزمایشها یک تپ کوتاه از نوترونها به کار می‌رود. تپها را می‌توان از یک چشمهٔ راکتور به دست آورد (بخش ۱۲-۳-۳ را ببینید). ولی اغلب بهتر است این تپها را توسط برخورد تپی از الکترونها یا پروتونهای انرژی - بالا با یک هدف مناسب ایجاد کنیم. در یک **چشمهٔ تراشهٔ پروتون**، تپهای پروتون با انرژی‌ای از مرتبهٔ $۸۰۰MeV$ از یک سنیکروترون به کار می‌روند. اگر مادهٔ هدف از جنس اورانیوم باشد، هر پروتون تا ۳۰ نوترون تولید می‌کند. این نوترونها به صورت تراشه‌هایی[1] توسط پروتونها از هسته‌های اورانیوم جدا می‌شوند، نوترونهای اضافی توسط شکافت هسته‌ها تولید می‌شوند.

انرژی نوترونهای گسیل شده نوعاً $۱MeV$ است -که برای مطالعات پراکندگی جامدها خیلی بزرگ است. از یک تیغهٔ پلی‌اتیلنی می‌توان به منزلهٔ کندکننده استفاده کرد؛ ضخامت تیغه چنان انتخاب می‌شود که توزیع مناسب انرژی نوترون برای آزمایشی که اجرا می‌شود حاصل شود. مخصوصاً اگر نوترونهای با انرژی‌ای بالاتر از انرژی نوترونهای حرارتی از یک راکتور مورد نیاز باشد چشمه‌های تراشه‌ای مفید خواهند بود؛ نوترونها آنقدر درون کندکننده باقی نمی‌مانند تا با دمای کندکننده به تعادل برسند و به آنها **فوق حرارتی** گفته می‌شود. تپ نوترون نوعاً به مدت $۱۰\mu s$ است و شامل طیف وسیعی از انرژیهای نوترون است.

۱۲-۳-۲ آشکارسازهای نوترون

نوترونها بدون بار هستند و بنابراین آشکارسازی مستقیم آنها مشکل است. ولی نوترونهای با انرژی پایین می‌توانند واکنشهای هسته‌ای را القا کنند که در آنها یونهای با انرژی بالا تولید می‌شوند، یونشی که این نوترونها ایجاد می‌کنند آن قدر قوی است، که قابل آشکارسازی است. یک واکنش از این قبیل که سطح مقطع بزرگی دارد، ($۲۱۰۰ \times ۱۰^{-۲۸} m^{۲}$ برای نوترونهای با طول موج $۱ \mathring{A}$) به ایزوتوپ بورون به جرم ۱۰ مربوط می‌شود

$$^{۱۰}B + n = {}^{۷}Li + {}^{۴}He + ۲/۳ MeV$$

از چنین واکنشی در شمارندهٔ نوترونی تناسبی $BF_۳$ بهره‌کشی می‌شود که در آن یونش در گاز $BF_۳$ ی غنی شده با ایزوتوپ ^{۱۰}B آشکار می‌شود.

۱- کلمه تراشه از فعل تراشیدن به معنای قطعه قطعه کردن می‌آید.

۱۲-۳-۳ روشهای زمان پرواز

برای تعریف و اندازه‌گیری انرژیهای نوترون دو روش به کار می‌رود: در این بخش شگردهای زمان پرواز را شرح می‌دهیم و در بخش بعد در مورد تکفام سازهای بلوری بحث می‌کنیم. سرعت نوترونی با طول موج ۲Å برابر است با

$$v = \frac{\hbar \kappa}{M_n} \approx \frac{10^{-34} \times 10^{10} \pi}{1/6 \times 10^{-27}} \; m s^{-1} \approx 2000 \, m s^{-1} \qquad (۱-۱۲)$$

سرعتی از این مرتبه را می‌توان با اندازه‌گیری زمان پرواز یک نوترون بر روی مسافتی چند متری تعیین کرد. لحظهٔ پایان پرواز را می‌توان با توجه به لحظهٔ ورود به آشکارساز تعیین کرد. اگر نوترونها به صورت تپها به طیف سنج وارد شوند لحظهٔ شروع پرواز نیز معلوم است. بنابراین روشهای زمان پرواز مخصوصاً برای استفاده با چشمه‌های تپی نوترون مناسب‌اند؛ نوترونهای با انرژی مختلف در هر تپ در لحظه‌های متفاوتی به آشکارساز وارد می‌شوند، و در نتیجه تفکیک انرژی در آزمایشهای تپی حاصل می‌شود.

یک طیف سنج ساده برای مطالعات پراش نوترون بر مبنای روشهای زمان پرواز در شکل ۱۲-۲ نشان داده شده است. آهنگ شمارش در آشکارساز به صورت تابعی از زمان ورود اندازه‌گیری می‌شود. زمان پرواز نوترونهای با طول موج λ (با اندازه حرکت p) برای پراکندگی کشسان برابر است با

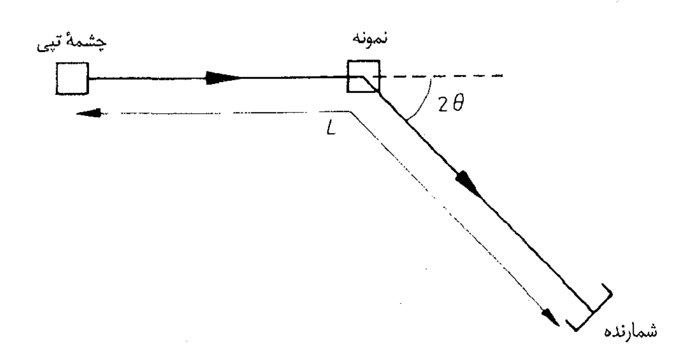
$$t = \frac{L}{v} = \frac{M_n \, L}{P} = \frac{\lambda \, M_n \, L}{h} \qquad (۲-۱۲)$$

که در آن L طول کل مسیر نوترون در چشمه تا آشکارساز از طریق نمونه است. پراش وقتی رخ می‌دهد که قانون براگ (معادلهٔ ۱-۳) ارضا شود

$$n\lambda = 2 d \sin \theta$$

برای یک مکان ثابت آشکارساز، θ همان گونه که در شکل ۱۲-۲ نشان داده شده است، توسط هندسهٔ آزمایش تعیین می‌شود.

برای مشاهدهٔ پراش از مجموعهٔ معینی از صفحات شبکه دو شرط باید ارضا شود: صفحات باید تحت زاویهٔ صحیح نسبت به باریکهٔ فرودی قرار گیرند و باریکه باید حاوی نوترونهای با طول موج مورد نیاز برای ارضای قانون براگ باشد. شرط نخست را می‌توان با استفاده از یک نمونهٔ پودری ارضا کرد (بخش ۱-۴ را ببینید) در نتیجه صفحات در تمام زوایای فرودی ممکن رخ می‌دهند. شرط دوم در صورتی ارضاء می‌شود که تپهای فرودی شامل نوترونهای با گسترهٔ انرژی وسیعی باشند. از ترکیب معادلات (۱-۳) و (۱۲-۲) در می‌یابیم که زمانهای پرواز برای



شکل ۱۲-۲ : طیف سنج زمان پرواز برای مطالعهٔ پراکندگی کشسان نوترونها. برای بررسی پراکندگی ناکشسان لازم است یک تکفام‌ساز اضافه کنیم تا انرژی هر یک از نوترونهای فرودی یا پراکنده مشخص شود.

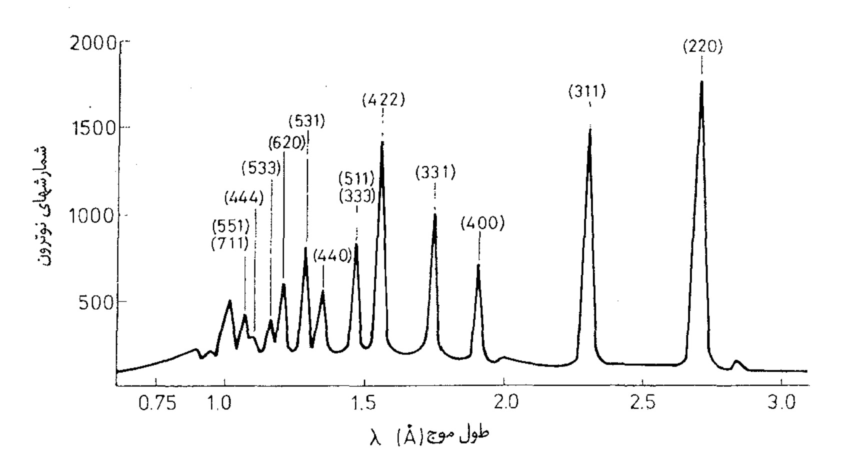
نوترونهایی که پراش براگ می‌یابند به قرار زیر است

$$t = \frac{M_n \; L\lambda}{h} \; = \frac{M_n \; L}{h} \;\; \frac{۲d}{n} \;\; \sin\theta \qquad (۱۲-۳)$$

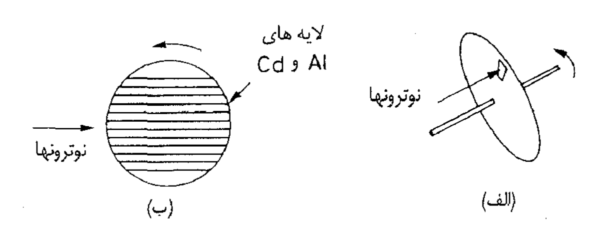
بنابراین ستیغها در آهنگ شمارش نوترون، در زمانهایی رخ می‌دهند که این معادله ارضا می‌شود. شکل (۱۲-۳) نمودار آهنگ شمارش برحسب زمان پرواز را برای چنین آزمایشی نشان می‌دهد. از معادلهٔ (۱۲-۳) برای برچسب‌زنی مجدد محور افقی با طول موج λ ی نوترونهای متناظر با یک زمان پرواز به خصوص استفاده شده است.

با استفاده از یک چشمهٔ تراشه‌ای که در بخش ۱۲-۳-۱ توصیف شد می‌توان تپهای نوترونی را به دست آورد. تپهای نوترونی را می‌توان با استفاده از یک **برشگر**، از باریکهٔ پیوستهٔ نوترونهای یک راکتور نیز به دست آورد. شکل ۱۲-۴ دو نوع برشگر را نشان می‌دهد. در نوع قرصی شکل، قرصی که برای نوترونها کدر است حول محوری موازی با باریکه می‌چرخد و عبور دسته‌های نوترون را از طریق یک یا چند شکاف نزدیک محیط قرص باعث می‌شود. برشگر نوع فرمی شامل یک ساندویچ بس لایه‌ای از ماده‌ای با جذب نوترونی بالا (برای مثال، کادمیوم برای نوترونهای با انرژی پایین، بورون برای نوترونهای با انرژی بالاتر) و ماده‌ای با جذب نوترونی پایین (برای مثال آلومینیوم) است که حول محوری عمود بر باریکه می‌چرخد؛ فقط وقتی این ساندویچ با باریکهٔ فرودی موازی است نوترونها عبور می‌کنند.

برای اجرای اندازه‌گیریهای پراکندگی ناکشسان با استفاده از روشهای زمان پرواز، لازم است یک تکفام‌ساز به طیف سنج شکل ۱۲-۲ اضافه شود، تا انرژی نوترونهای فرودی یا انرژی



شکل ۱۲-۳: نقشهٔ پراش پودر سلیسیم، که با طیف سنج زمان پرواز تحت زاویهٔ پراکندگی 2θ برابر با $90°$ اندازه‌گیری شده است. اقتباس شده با اجازه از بنت‌لبچ [۱]



شکل ۱۲-۴: (الف) برشگر نوع قرصی (ب) برشگر نوع فرمی

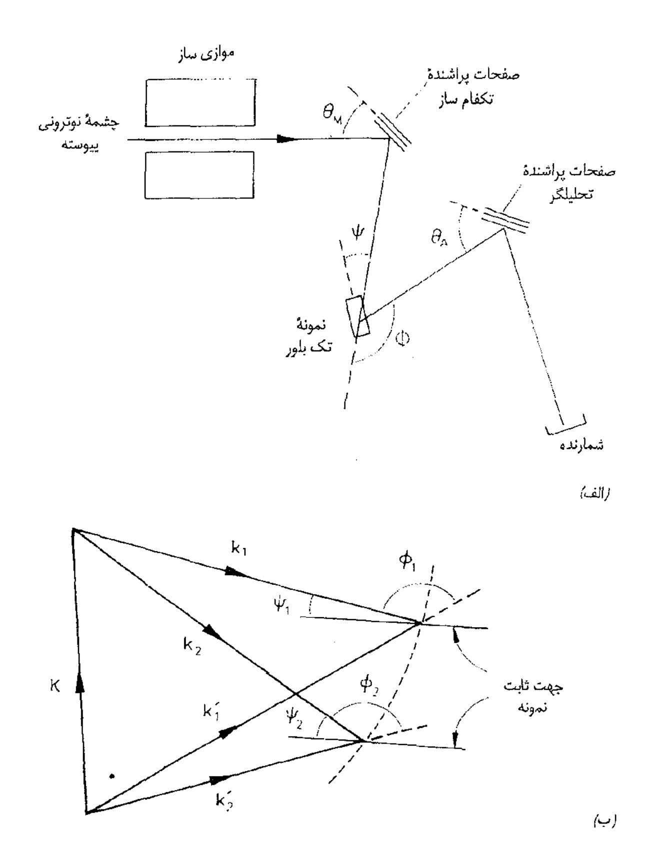
پراکنده مشخص شود، این کار با زمان کل پرواز باعث تعیین هر دو انرژی نوترونهای فرودی و انرژی نوترونهای پراکنده شده می‌شود. تکفام‌سازی باریکهٔ فرودی با قراردادن یک برشگر در باریکهٔ فرودی در فاصله‌ای از چشمهٔ تپ نوترونی حاصل می‌شود. این برشگر فقط آن نوترونهایی را عبور می‌دهد که در زمانی که برشگر شفاف است وارد شده‌اند و به این طریق گزینش سرعت حاصل می‌شود. با قراردادن یک بلور تکفام‌ساز در سر راه هر یک از باریکه‌های فرودی یا پراکنده شده نیز می‌توان تکفام‌سازی را حاصل کرد. تکفام‌سازی، تعداد نوترونهای موجود در تپ را کاهش می‌دهد و جمع‌آوری نتایج را کند می‌کند. برای جبران این مسئله می‌توان از چند آشکارساز استفاده کرد و در نتیجه تعدادی از زوایای پراکندگی را به طور همزمان مورد مطالعه قرار داد.

۱- *Bente Lebech, Risφ Report, R164 (1967), Risφ Nationnal Laboratory, Denmark.*

۱۲-۳-۴ تکفام سازهای بلوری

یک روش دیگر به جای روشهای زمان پرواز برای گزینش انرژی نوترون استفاده از بازتاب براگ از تک بلوری با سمتگیری مناسب است. این شگرد برای ساختن تکفام‌ساز و تحلیل‌گر **در طیف‌سنج سه محوری** که در شکل ۱۲-۵ نشان داده شده است به‌کار می‌رود. تکفام‌ساز نوترونهای با طول موج مورد نظر را (که با تغییر θ_M تغییر می‌کند) به سوی نمونه پراشیده می‌کند و اجازه می‌دهد که باقیماندهٔ ناپراشیدهٔ باریکهٔ نوترون توسط حفاظ (که در شکل ۱۲-۵ نشان داده نشده است) جذب شود. معمولاً از یک بازتاب (۱۱۱) از بلور Ge استفاده می‌شود زیرا عملاً در آن هیچ بازتاب مرتبهٔ دوم (۲۲۲) از ساختار الماسی وجود ندارد (بخش ۱۱-۲-۴)، بنابراین از بازتاب نوترونهای با نصف طول موج مورد نظر اجتناب می‌شود. از گرافیت پیرولیتی و تک بلورهای Be نیز برای تکفام‌سازی نوترون استفاده می‌شود. تک بلورها اغلب بیش از حد کامل‌اند و معمولاً نیاز می‌شود که کمی آنها را کرنش دهیم تا ساختار موزاییکی به آنها بدهیم؛ این عمل گسترهٔ طول موجهای بازتابیده توسط بلور را افزایش می‌دهد و بنابراین شدت افزایش می‌یابد (بیکن ۳۳). اگر نوترونهای قطبیده مورد نیاز باشند، برای تکفام‌سازی می‌توان از یک بلور فرومغناطیس مغناطیده استفاده کرد (بخش ۱۲-۵)

تحلیلگر شامل بلور دیگری است که برای بازتاب براگ تنظیم شده است و از آن برای تعیین انرژی نوترونهای پراکنده شده که به آشکارساز می‌رسند استفاده می‌شود؛ انرژی با تغییر θ_A تغییر می‌کند. برای مطالعات پراکندگی کشسان، به تحلیلگر نیاز نیست. برای پراکندگی ناکشسان، طیف سنج سه محوری نسبت به طیف‌سنج زمان پرواز، دارای این نقطهٔ ضعف است که در آن در هر لحظهٔ به خصوص تنها یک انرژی فرودی و یک انرژی خروجی و یک زاویهٔ پراکندگی مورد مطالعه قرار می‌گیرند. از طرف دیگر شار نوترون پیوسته است و به شکل تپ نیست، و همان‌گونه که اکنون توضیح می‌دهیم طیف سنج سه محوری سهولت بررسی تغییرات انرژی نوترونها برای یک مقدار ثابت بردار پراکندگی $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ را باعث می‌شود. در طیف‌سنج زمان پرواز، برای نوترونهای با بردار موج فرودی معلوم $\mathbf{k}$، بردار موج پراکنده شده به انرژی نوترونهای پراکنده شده بستگی دارد و بنابراین $\mathbf{K}$ نیز همین بستگی را دارد. در طیف سنج سه محوری می‌توان با ثابت نگهداشتن θ_M، انرژی فرودی را تثبیت کرد. انرژی خروجی با تغییر دادن θ_A تنظیم می‌شود، ولی تغییر حاصل در $|\mathbf{k}'|$ را می‌توان با تغییر همزمان در زاویهٔ پراکندگی ϕ جبران کرد تا $|\mathbf{K}| = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ ثابت بماند؛ زاویهٔ ψ ی نمونه را نیز می‌توان چنان تغییر داد که $\mathbf{K}$ سمتگیری خود نسبت به محورهای بلور را حفظ کند (شکل ۱۲-۵ (ب) را ببینید). بنابراین با تغییر همزمان سه زاویهٔ θ_A، ϕ و ψ، می‌توان تغییر آهنگ شمارش نوترون برحسب انرژی نوترونهای پراکنده شده، $E' = (\hbar^2 \kappa'^2 / 2M_n)$، در انرژی ثابت نوترون



شکل ۱۲-۵ : (الف) طیف‌سنج نوترونی سه محوری، که به دلیل دورانهای همزمان حول سه محور در حین کار چنین نامیده می‌شود (به متن رجوع کنید). (ب) نموداری برای نمایش مد عمل **K**ی ثابت در طیف‌سنج سه محوری. برای یک انرژی فرودی ثابت ($|\mathbf{k}_1| = |\mathbf{k}_2|$ و ثابت $= \theta_M$) ولی انرژی پراکنده شدهٔ متغیر ($|\mathbf{k}'_1| \neq |\mathbf{k}'_2|$ و ثابت $\neq \theta_A$) می‌توان **K** را از نظر بزرگی و جهت نسبت به‌نمونه ثابت نگه داشت و تغییرات مناسب در ψ و ϕ ایجادکرد.

فرودی ($E(=\hbar^2\kappa^2/2M_n)$ و بردار پراکندگی ثابت **K** بررسی کرد. شکل (۱۲-۶) داده‌های حاصل از این روش برای پراکندگی از یک تک بلور منیزیم را نشان می‌دهد؛ توضیح داده‌ها در بخش ۱۲-۴ ارائه می‌شود.

۱۲-۴ تعیین طیفهای فونون

در بخش ۱۱-۲ پراش یک موج توسط یک بلور کاملاً دوره‌ای را بررسی کردیم. در دمای

متناهی یک بلور واقعی کاملاً دوره‌ای نیست زیرا ارتعاشات شبکه که به طور گرمایی برانگیخته می‌شوند حضور دارند. اکنون رهیافت خود را چنان تعمیم می‌دهیم که این امکان نیز مجاز باشد؛ برای سهولت فرض می‌کنیم، که یک تک موج شبکه با بردار موج $\mathbf{q}$ و بسامد ω حاضر باشد، به طوری که مکان اتم nام در داخل بلور عبارت باشد از [1]

$$\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_n^\circ + \mathbf{u}_\circ \cos(\mathbf{q}.\mathbf{r}_n^\circ - \omega t) \qquad (۴-۱۲)$$

که در آن r_n° مکان تعادل است، و بزرگی و جهت $\mathbf{u}_\circ$ دامنه قطبش موج شبکه را می‌دهد. در خواهیم یافت که این اختلال دوره‌ای بلور کامل، بیشینه‌های پراکندگی اضافی‌ای را به بار می‌آورد که مانستهٔ شبحهایی است که در توریهای پراش اپتیکی حاوی خطای شیارزنی دوره‌ای، رخ می‌دهند *(Born and Wolf, Principles of Optics, Pergamon, London(1959), P 407)*

دامنهٔ موج پراکنده شده که توسط معادلهٔ (۱۱-۲) بیان می‌شود چنین است

$$A = \sum_n f_n \; exp\,[i(\mathbf{K}.\mathbf{r}_n + \Omega t)] \qquad (۵-۱۲)$$

که در آن چون می‌خواهیم پراکندگی ناکشسان را بررسی کنیم، وابستگی زمانی مربوط به انرژی $\hbar\Omega$ ی نوترون فرودی را وارد ساخته‌ایم. با درج تغییر مکانهای اتمی از معادلهٔ (۱۲-۴) نتیجه می‌گیریم

$$A = \sum_n f_n \; exp\left\{-i\,[\mathbf{K}.(\mathbf{r}_n^\circ + \mathbf{u}_\circ \cos(\mathbf{q}.\mathbf{r}_n^\circ - \omega t)) + \Omega t\,]\right\}$$

$$\approx \sum_n f_n \; exp\,[-i(\mathbf{K}.\mathbf{r}_n^\circ + \Omega t)]\left\{1 - i\mathbf{K}.\mathbf{u}_\circ \cos(\mathbf{q}.\mathbf{r}_n^\circ - \omega t)) - \ldots\right\}$$

(۶-۱۲)

که در آن جمله درون آکولاد در سطر دوم از بسط $exp\,[-i\,\mathbf{K}.\mathbf{u}_\circ \cos(\mathbf{q}.\mathbf{r}_n^\circ - \omega t)]$ به دست آمده است؛ این در صورتی که دامنهٔ ارتعاشات کوچک باشد درست است. با نوشتن کسینوس برحسب نماهای مختلط، معادلهٔ (۱۲-۶) چنین می‌شود.

$$A = \sum_n f_n \; exp\,[-i(\mathbf{K}.\mathbf{r}_n^\circ + \Omega t)] - \frac{1}{2}\, i\mathbf{K}.\mathbf{u}_\circ \sum_n f_n \; exp\left\{-i\,[(\mathbf{K}-\mathbf{q}).\mathbf{r}_n^\circ + (\Omega+\omega)t]\right\}$$

$$- \frac{1}{2}\, i\mathbf{K}.\mathbf{u}_\circ \sum_n f_n \, exp\left\{-i\,(\mathbf{K}-\mathbf{q}).\mathbf{r}_n^\circ + (\Omega-\omega)t\,]\right\} + (\text{جملات از مرتبهٔ } u_\circ^2 \text{ و بالاتر})$$

(۷-۱۲)

۱- در این فصل روال متداول برای نامگذاری بردار موج فونون $\mathbf{q}$ به منظور تمایز آن از بردار موج $\mathbf{k}$ ی الکترون یا نوترون را دنبال می‌کنیم.

در بخش ۱۱-۲ نشان دادیم که وقتی $\mathbf{K}=\mathbf{G}$ باشد جملهٔ نخست یک ستیغ تیز پراش براگ را به بار می‌آورد، که در آن $\mathbf{G}$ هر بردار شبکهٔ وارون است؛ این جمله با همان بسامد Ω ی تابش فرودی نوسان می‌کند و بنابراین با پراکندگی نوترونی کشسان از یک بلور دوره‌ای کامل متناظر است.

با استدلالی مشابه با آنچه که در بخش ۱۱-۲ به کار رفت در می‌یابیم که وقتی $\mathbf{K}-\mathbf{q}=\mathbf{G}$، یا

$$\mathbf{k}'=\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G} \qquad (۸-۱۲)$$

جملهٔ دوم یک بیشینهٔ تیز می‌دهد. دامنهٔ بیشینه با $\mathbf{K}.\mathbf{u}_{\circ}$ متناسب است و با بسامد Ω' که توسط معادلهٔ زیر بیان می‌شود نوسان می‌کند.

$$\Omega'=\Omega+\omega \qquad (۹-۱۲)$$

معادلات (۱۲-۸) و (۱۲-۹)، وقتی در $\hbar$ ضرب شوند، به ظاهر قوانین پایستگی اندازه حرکت و انرژی برای فرایندی را دارند که در آن یک نوترون، با بردار موج $\mathbf{k}$، فونونی با بردار موج $\mathbf{q}$ را جذب می‌کند و به حالتی با بردار موج $\mathbf{k}'$ پراکنده می‌شود. این تعبیر کوانتومی محاسبهٔ کلاسیکی فوق است. ولی، در تعبیر معادلهٔ (۱۲-۸) به عنوان یک معادلهٔ پایستگی اندازه حرکت باید احتیاط کرد. مطمئناً این درست است که بلور در فرایند پراکندگی ضربه‌ای برابر با $\hbar(\mathbf{k}-\mathbf{k}')=-\hbar\mathbf{K}=\hbar(-\mathbf{q}-\mathbf{G})$ دریافت می‌کند، و این ضربه به تکیه‌گاه بلور منتقل می‌شود. تفکیک این ضربه به یک بخش $-\hbar\mathbf{G}$ که به تمامی شبکه داده می‌شود و یک بخش $-\hbar\mathbf{q}$ مربوط به جذب یک فونون صرفاً یک قرارداد است. این تقسیم اختیاری است به طوری که فونون با بردار موج $\mathbf{q}$ را می‌توان با بردار موج $\mathbf{q}+\mathbf{G}'$ نیز نمایش داد که در آن $\mathbf{G}'$ هر بردار شبکهٔ وارون است (بخش ۱۱-۴ را ببینید). با قراردادن $\mathbf{G}'=\mathbf{G}$، می‌توان از این امکان برای مربوط ساختن کل تغییر در اندازه حرکت به فونون و هیچ تغییری در اندازه حرکت تمامی شبکه استفاده کرد! همان طور که قبلاً بیان کردیم کمیت $\hbar\mathbf{q}$ اندازه حرکت بلوری نامیده می‌شود، زیرا در معادلاتی مانند معادلهٔ (۱۲-۸) به منزلهٔ یک اندازه حرکت رفتار می‌کند.

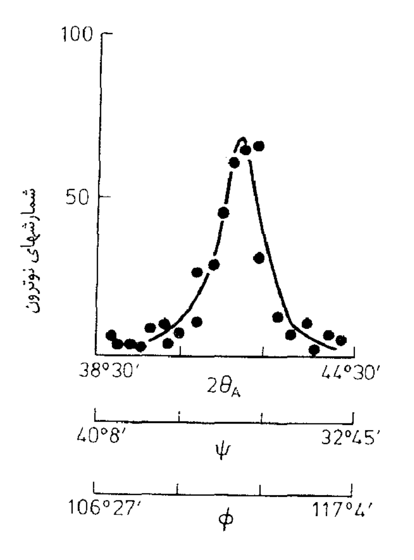
جملهٔ سوم در معادلهٔ (۱۲-۷) نمایشگر پراکندگی نوترونی است که در آن یک فونون با بردار موج $\mathbf{q}$ **گسیل** می‌شود. جمله‌های از مرتبهٔ $u_{\circ}^{2}$ و بالاتر به فرایندهای کوانتومی‌ای که در آنها دو یا چند فونون گسیل یا جذب می‌شوند مربوط می‌شوند[۱]

از معادلهٔ (۱۲-۷) در می‌یابیم که دامنهٔ پراکندگی ناشی از فرایندهای گسیل و جذب تک ـ فونونی با $u_{\circ}$ متناسب است و بنابراین شدت با $u_{\circ}^{2}$، یعنی شدت فونون و یا تعداد فونونها

۱- یک پیامد قابل اندازه‌گیری جمله‌های مرتبهٔ دوم، کاهش شدت ستیغهای پراش براگ با افزایش دما توسط **عامل دبی - والر** است؛ این عامل را می‌توان به صورت $exp(-k_BT\,|\mathbf{K}|^{2}/M\omega^{2}_{D}$ تخمین زد که در آن M و ω_D بسامد دبی است.

متناسب است. محاسبهٔ کلاسیکی ما در اینجا کاملاً درست نیست؛ محاسبهٔ مکانیک کوانتومی این نتیجه را ارائه می‌دهد، که اگر n تعداد فونونهای ابتدایی موجود در یک مد شبکه باشد، احتمال گسیل با $(n+1)$ و احتمال جذب با n متناسب است[1]. در دماهای پایین، وقتی تعداد بسیار کمی فونون موجود دند ($n \ll 1$) نتیجه می‌شود که فقط فرایند گسیل فونون می‌تواند رخ دهد؛ هیچ فونونی برای جذب وجود ندارد.

از آنجا که طیف‌سنج سه محوری را می‌توان برای بررسی پراکندگی نوترون در مقادیر ثابت بردار پراکندگی $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ به کار برد، این وسیله برای مطالعهٔ روابط پاشندگی فونون ابزار ممتازی است. طرز کار چنین است که مقدار ثابت $\mathbf{K}$ را برابر با بردار موج $\mathbf{q}$، که انرژی آن باید تعیین شود (یا برابر با $\mathbf{q}+\mathbf{G}$ که در آن $\mathbf{G}$ هر بردار شبکهٔ وارون است) قرار می‌دهیم؛ این تضمین می‌کند که معادلهٔ (۱۲-۸) همواره ارضا شود. آهنگ شمارش نوترون به صورت تابعی از انرژی نوترونهای پراکنده شده وقتی به ستیغ می‌رسد که معادلهٔ (۱۲-۹) نیز ارضا شود. چنین ستیغی در شکل ۱۲-۶ مشاهده می‌شود و از مکان این ستیغ می‌توان انرژی فونونهای با عدد موج $\mathbf{q}$ را تعیین کرد. پدیدار شدن بیش از یک ستیغ نشانهٔ آن است که فونونهای با بیش از یک انرژی، برای این عدد موج رخ می‌دهند. وقتی که انرژیهای فونونهای با یک عدد موج به خصوص تعیین شدند، آزمایش می‌تواند در دیگر مقادیر $\mathbf{K}$ و لذا در دیگر مقادیر عدد موج فونون تکرار شود.



شکل ۱۲-۶: پراکندگی ناکشسان نوترون از یک بلور منیزیم که با استفاده از یک طیف‌سنج نوترونی سه محوری در مد عمل $\mathbf{K}$ ی ثابت مشاهده شده است. مقادیر θ_A، Ψ و ϕ که برای ثابت نگهداشتن $\mathbf{K}$ مورد نیازاند نیز نشان داده شده‌اند.
(اقتباس با اجازه از پی.ک. اینگار[2])

۱- این موضوع در فصل ۴ کتاب فاینمن[6] برای هر ذره‌ای که از آمار بوز - اینشتین پیروی می‌کند نشان داده شده است. در مورد به خصوص فوتونها (تابش جسم - سیاه، کتاب مندل[2] را ببینید) ۱ در $n+1$ مربوط به گسیل خود به خودی است.

۲- *P.K.Iyengar in Thermal Neurtron Scattering, ed. P. A. Egelstaff, Academic Press, London (1965)*

بنابراین دستیابی به طیف فوتونی کامل امکانپذیر است. شکل ۱۲-۷ روابط پاشندگی فوتون برای پتاسیم را نشان می‌دهد که به این روش حاصل شده است.

۱۲-۵ پراکندگی مغناطیسی

۱۲-۵-۱ تعیین ساختار مغناطیسی

قبلاً بیان شد، که نوترون علاوه بر پراکندگی هسته‌ای، می‌تواند توسط الکترونهای موجود در یک جامد نیز به‌گونه مغناطیسی پراکنده شود. این پراکندگی توسط در نظر گرفتن انرژی پتانسیل نوترون در میدان مغناطیسی الکترونها به منزلهٔ یک اختلال، محاسبه شده است. این محاسبه طولانی است و تعبیر جزئیات نتایج تجربی، به دلیل اثر متقابل بین پراکندگی هسته‌ای و مغناطیسی، پیچیده و مشکل می‌شود (بیکن [۳۳] را ببینید). برای تعیین ساختار مغناطیسی نتیجهٔ مهم این است که پراکندگی مغناطیسی نوترون توسط اتمی با گشتاور مغناطیسی با سهم زیر در طول پراکندگی توصیف می‌شود

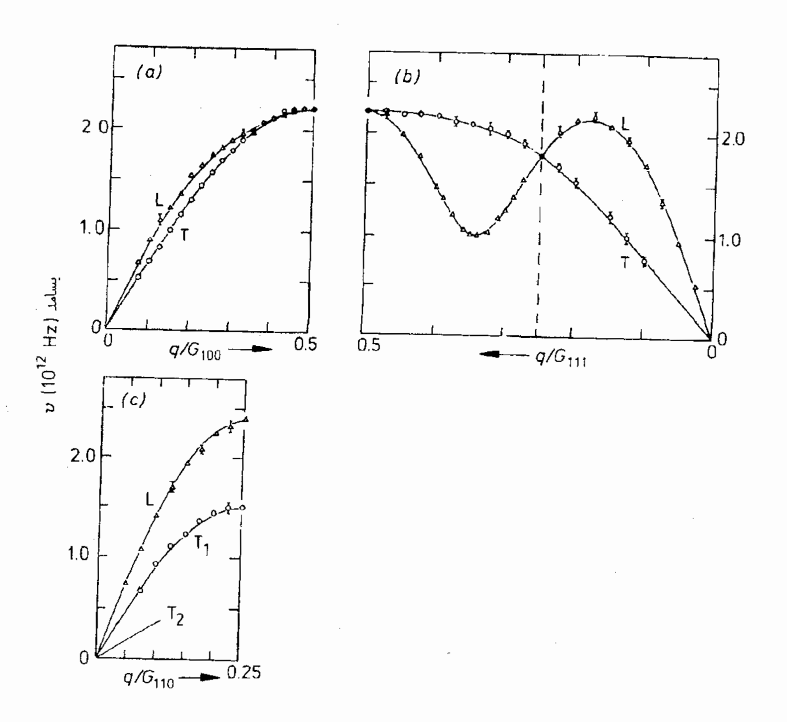
$$b_M = \pm p \sin \alpha \qquad (۱۲-۱۰)$$

که در آن α زاویه بین گشتاور مغناطیسی اتمی و بردار پراکندگی **K** است. علامت + یا − به سمتگیری اسپین نوترون بستگی دارد[۱]. ضریب p با گشتاور مغناطیسی اتمی و گشتاور نوترون متناسب است و با رفتاری مشابه با عامل پراکندگی اتمی f برای پرتوهای X، با افزایش زاویهٔ پراکندگی کاهش می‌یابد (مسئلهٔ ۱۲-۱ را ببینید).

در یک بلور پارامغناطیس گشتاورهای مغناطیسی اتمی به طور کاتوره‌ای نسبت به **K** سمتگیری نموده‌اند؛ بنابراین α به طور کاتوره‌ای از اتمی به اتم دیگر تغییر می‌کند، در نتیجه طول پراکندگی کل برای یک نوترون به طور کاتوره‌ای بین $b+p$ و $b-p$ تغییر می‌کند، که در آن b سهم پراکندگی هسته‌ای در طول پراکندگی است. در بخش ۱۱-۲ دیدیم که ستیغهای تیز پراش براگ از آن رو رخ می‌دهند که بلور در مقابل امواج فرودی، مانند شبکه‌ای از واحدهای تکرار یکسان به نظر می‌رسد؛ چون سهم مغناطیسی در پراکندگی به طور کاتوره‌ای از یک اتم به اتم دیگر تغییر می‌کند، در یک جامد پارامغناطیس پراکندگی مغناطیسی در دامنهٔ ستیغهای براگ سهیم نیست. پراکندگی مغناطیس، یک شدت متناهی نوترون بین ستیغهای براگ به وجود می‌آورد که با زاویهٔ پراکندگی به طور هموار تغییر می‌کند. گفته می‌شود که پراکندگی مغناطیسی ناشی از جامدهای پارامغناطیسی، **ناهمدوس** است[۲].

۱- اسپین نوترون می‌تواند موازی یا پادموازی با هر دو جهت عمود بر **K** و عمود بر گشتاور اتمی باشد.

۲- کسری از پراکندگی‌هسته‌ای نیز می‌تواند ناهمدوس، یعنی در زوایایی بین ستیغهای براگ پراکندگی هسته‌ای ناهمدوس از آن رو بروز می‌کند که برخی عناصر بیش از یک ایزوتوپ دارند، این ایزوتوپها دارای



شکل ۱۲-۷: روابط پاشندگی فونون برای پتاسیم *bcc* **که توسط پراکندگی ناکشسان نوترون با استفاده از یک طیف سنج سه محوری به دست آمده‌اند. منحنی‌ها برای بردار موج q در جهتهای (الف) [۱۰۰]، (ب) [۱۱۱]، (ج) [۱۱۰] نشان داده شده‌اند. مثلثها ودایره‌ها به ترتیب مدهای طولی و عرض را نشان می‌دهند. در جهتهای [۱۰۰] و [۱۱۱] دو مد عرضی تبهگن‌اند. در جهت [۱۱۰] فقط شیب اولیه یکی از مدهای عرضی نشان داده شده است. در (الف) و (ج) منحنی‌ها تا مرز اولین منطقهٔ بریلوئن رسم شده‌اند. در (ب) مکان مرز منطقهٔ اول بریلوئن با خط چین عمودی نشان داده شده است؛ قسمتهای سمت چپ عمودی نشان داده شده است با قسمتهای سمت چپ این خط چین را می‌توان با منها کردن یک بردار شبکهٔ وارون مناسب به منطقهٔ اول بریلوئن منتقل ساخت و برای تعریف بردارهای شبکهٔ وارون $\mathbf{G}_{100}$، $\mathbf{G}_{111}$ و $\mathbf{G}_{110}$ از یاخته یکّه مکعبی قراردادی شبکهٔ وارون استفاده شده است. برای کمک به فهم این شکل به خواننده توصیه می‌شود مسئلهٔ ۱۲-۴ را حل کند.**

(اقتباس با اجازه از

(R. A. Cowley, A. D. B. Woods and G. Dolling, Phys. Rev. 150, 487 (1966)

طولهای پراکندگی هسته‌ای کاملاً متفاوت‌اند و نیز به دلیل اینکه، برای هسته‌های با اسپین متناهی، طول پراکندگی به سمتگیری نسبی اسپین هسته‌ای و اسپین نوترون بستگی دارد. توزیع ایزوتوپها و سمتگیری اسپین هسته‌ای در درون بلور معمولاً به طور کاتوره‌ای تغییر می‌کنند.

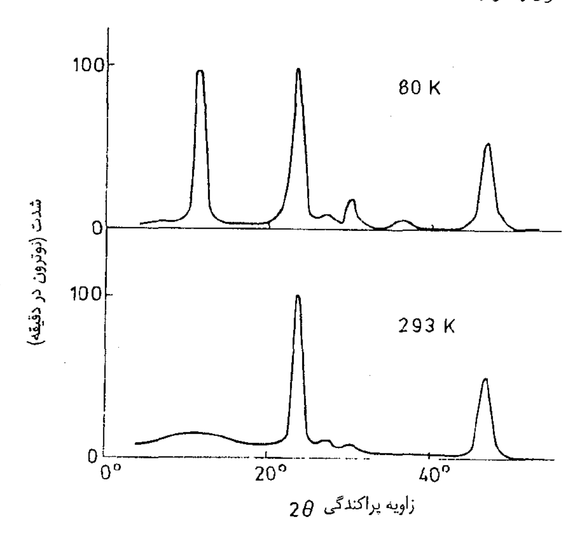
ولی، در یک بلور با نظم فرومغناطیسی، α از یک اتم به اتم دیگر به طور کاتوره‌ای تغییر نمی‌کند و پراکندگی مغناطیسی به طور **همدوس** به پراکندگی هسته‌ای اضافه می‌شد و در سیتغهای براگ سهیم می‌شود. ولی خصوصیات اساسی ستیغهای براگ در این مورد تغییر نمی‌کند[1]. در بلورهای پاد فرومغناطیس اثرهای بارزتری مشاهده می‌شوند، زیرا مقدار α برای گشتاورهای مغناطیسی واقع بر زیر شبکه‌های A و B برابر و مخالف می‌باشند (بخش ۸-۴)؛ اینها در مقابل یک نوترون به منزلهٔ ***دو نوع اتم متفاوت*** با طولهای پراکندگی همدوس $b+p\,sin\,\alpha$ و $b-p\,sin\,\alpha$ رفتار می‌کنند. این امر، یک یاختهٔ یکّهٔ مغناطیسی را نتیجه می‌شود که عموماً بزرگتر از یاختهٔ یکّهٔ شیمیایی است.

برای نشان دادن این موضوع MnO را که ساختار $NaCl$ دارد در نظر می‌گیریم (شکل ۱-۱۳). MnO پادمغناطیس با دمای نیل $۱۲۰K$ است. نتایج آزمایشهای پراکندگی نوترون بر روی نمونهٔ پودری MnO در $۸۰K$ در دمای اتاق در شکل ۱۲-۸ نشان داده شده‌اند. زیر دمای نیل ستیغهای پراش اضافی، به خصوص یک ستیغ قوی در حدود ۱۲° مشاهده می‌شود. این تقریباً نصف زاویهٔ پراکندگی ستیغ (۱۱۱) است که هم در بالا و هم در زیر دمای نیل پدیدار می‌شود، و بنابراین پراکندگی از صفحات شبکه‌ای به فاصلهٔ دو برابر صفحات (۱۱۱) را نشان می‌دهد.

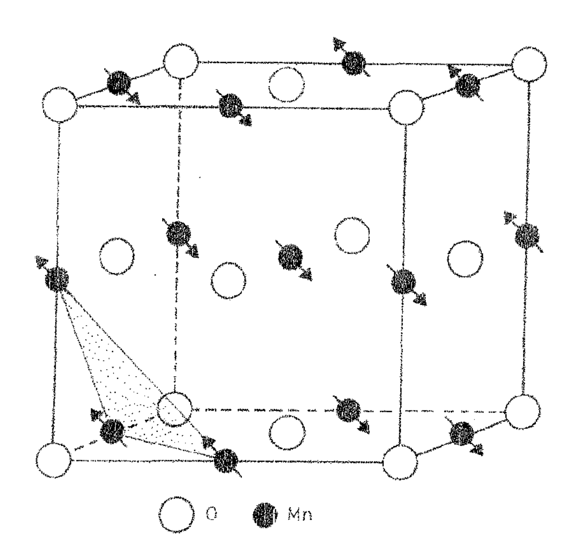
این نتایج را می‌توان با ساختار نشان داده شده در شکل ۱۲-۹ توجیه کرد، که در آن صفحات (۱۱۱) یک در میان Mn، دارای گشتاورهای مغناطیسی موازی و در جهت مخالف یکدیگرند؛ گشتاورهای درون یک صفحهٔ (۱۱۱) به طور فرومغناطیسی نسبت به یکدیگر به صف در می‌آیند ولی نسبت به گشتاورهای واقع بر صفحات مجاور به طور پادفرومغناطیسی به صف در می‌آیند. به دلیل سمتگیری مخالف، اتمهای Mn واقع بر صفحات متوالی برای نوترونها دارای طولهای پراکندگی متفاوت‌اند و وقتی اختلاف فاز بین صفحات متوالی فقط π باشد یک پراش بیشینه می‌تواند رخ دهد؛ بنابراین ستیغ در زاویهٔ پراکندگی ۱۲° در شکل ۱۲-۸ توجیه می‌شود. یاختهٔ یکّه مغناطیسی در زیر دمای نیل دارای دو برابر بعد خطی یاختهٔ یکّهٔ شیمیایی نشان داده شده در شکل ۱۲-۹ است. اندازه‌گیریهای پرتو X دقیق، با تفکیک بهتر از اندازه‌گیریهای نوترون، نشان می‌دهند که یاختهٔ یکّه در زیر دمای نیل دیگر دقیقاً مکعبی نیست و با انبساط در امتداد یک جهت [۱۱۱] کج شده است. این با تقارن ساختار مغناطیسی حاصل از اندازه‌گیریهای نوترونی سازگار است.

با وجودی که تعیین ساختارهای مغناطیسی به طور عمده توسط پراش نوترون انجام یافته

۱- برای تولید یک باریکهٔ تکفام از نوترونهای ***قطبیده*** می‌توان از بلورهای فرومغناطیس استفاده کرد. ستیغ براگی برگزیده می‌شود که برای آن طول پراکندگی کل $b\text{-}p\ sin\alpha$ برای نوترونهای با یک قطبش نزدیک به صفر باشد؛ آنگاه باریکهٔ پراشیده تقریباً به طور کامل نوترونهای با قطبش مخالف را در بردارد.



شکل ۱۲-۸: پراش نوترون از MnO ی پودری در بالا و در زیر دمای پادفرومغناطیسی نیل ۱۲۰K. مخصوصاً به بازتاب اضافی در °۱۲ که بازتاب (۱۱۱) از یاختهٔ یکهٔ دو برابر مغناطیسی است توجه کنید. (اقتباس با اجازه از *(C. G. Shull and J. S. Smart, Phys, Rev.* **76**, *1256 (1949)*



شکل ۱۲-۹: ساختار پادفرومغناطیسی MnO یک یاختهٔ یکّهٔ شیمیایی این ساختار نشان داده شده است؛ یاختهٔ یکّهٔ مغناطیسی دارای ابعاد خطی دو برابر است. اتمهای Mn در صفحات یک در میان (۱۱۱) دارای مغناطش‌های در جهت مخالف‌اند.

است، استفاده از پرتوهای X برای این منظور امکانپذیر است. پراکندگی پرتوهای قطبیدهٔ دایره‌ای توسط یک اتم به طور ضعیف به اسپین و اندازه حرکت زاویه‌ای مداری اتم بستگی دارد. پرتوهای X با شدت بالا از چشمه‌های سینکروترونی (بخش ۱-۴-۲) را می‌توان برای بهره‌گیری از این امکان به کار برد. با وجودی که تابش در جهت مماس بر حرکت ذره، در صفحهٔ مدار سنیکروترون شدیداً قطبیده است، پرتوهای قطبیدهٔ دایره‌ای X با شدت بسیار پایین‌تر، تحت زاویهٔ کوچکی نسبت به این جهت گسیل می‌شوند. شدت این تابش قطبیده هنوز آن قدر بالاست که می‌توان ساختارهای مغناطیسی را بررسی کرد.

۱۲-۵-۲ تعیین طیفهای مگنون

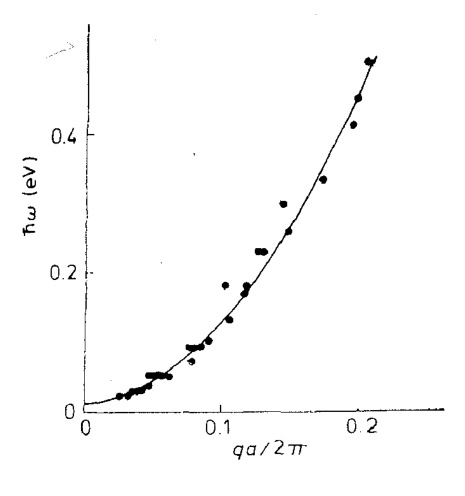
چون پراکندگی مغناطیسی نوترونها به سمتگیری گشتاور مغناطیسی اتمی بستگی دارد، حضور یک موج اسپینی به مودوله کردن خواص پراکندگی شبکه منجر می‌شود. از دیدگاه بحث ما در مورد پراکندگی نوترونها توسط ارتعاشات شبکه در بخش ۱۲-۴، خواننده شگفت زده نخواهد شد اگر بداند که می‌توان وقوع پراکندگی یک نوترون را توسط گسیل یا جذب یک مگنون با پایستگی اندازه حرکت و انرژی تصویر کرد:

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{G} \tag{۱۲-۱۱}$$

$$\Omega' = \Omega \pm \omega \tag{۱۲-۱۲}$$

که در آن علامت بالایی مربوط به جذب و علامت پایینی مربوط به گسیل است. بنابراین پراکندگی ناکشسان نوترونها، تعیین تجربی رابطهٔ بین بسامد مگنون ω و بردار موج $\mathbf{q}$ را میسر می‌سازد. پدیدار شدن بردار شبکهٔ وارون $\mathbf{G}$ در معادلهٔ (۱۲-۱۱) و همچنین در معادلهٔ (۱۲-۸)، پیامدی از ابهامی است که در بردار موج برانگیختگی‌ها در یک شبکهٔ دوره‌ای وجود دارد. مگنونی با عدد موج $\mathbf{q}$ را می‌توان به طور معادل توسط عدد موج $\mathbf{q} + \mathbf{G}$ نیز نشان داد؛ $\hbar\mathbf{q}$ اندازه حرکت بلوری مگنون است.

همانند فونونها، در اینجا نیز برای تعیین منحنی‌های پاشندگی مگنون استفاده از طیف سنج سه محوری در مد $\mathbf{K}$ ی ثابت آن مناسب است. از معادلهٔ (۱۲-۱۱) در می‌یابیم که این کار معادل با جستجوی جذب مگنونهای با عدد موج $\mathbf{q} = \mathbf{K} - \mathbf{G}$ (یا گسیل مگنونهای با عدد موج $\mathbf{G} - \mathbf{K}$) است. بنابراین، بسامد مگنونهای با عدد موج معلوم را می‌توان از مقدار $\Omega - \Omega'$، که در آن یک ستیغ در شدت پراکندگی مشاهده می‌شود، تعیین کرد. پراکندگی ناکشسان نوترون برای تعیین طیف موج اسپینی شکل ۱۲-۱۰ برای آلیاژ فرومغناطیسی آهن - کبالت به کار برده شد. برخلاف پیش‌بینی معادلهٔ (۸-۳۱)، انرژی مگنون در $\mathbf{q} = ۰$ صفر نمی‌شود. این، نتیجه‌ای از ناهمسانگردی بلورین است که در بخش ۸-۵-۲ از آن چشم‌پوشی کردیم. یک جهت برتر برای



شکل ۱۲-۱۰: طیف موج اسپینی $Co_{0/92}\ Fe_{0/08}$ **فرومغناطیسی که با استفاده از پراکندگی ناکشسان نوترون به دست آمده است. به گاف انرژی متناهی در ۰=q ناشی از ناهمسانگردی بلورین توجه کنید.**
(اقتباس با اجازه از
R. n. Sinclair and B. N. Brockhouse, Phys. Rev. **120**, *1638 (1960))*

مغناطش درون شبکه وجود دارد و برای ایجاد یک چرخش یکنواخت فضایی ($q = 0$) نسبت به این جهت به یک مقدار متناهی انرژی نیاز است.

۱۲-۶ پراکندگی الکترون

چنانکه قبلاً بیان کرده‌ایم، باریکه‌های الکترون با انرژی ($\approx 100eV$) که برای مطالعات پراش مناسب فقط مسافتی کوتاه ($\approx 5Å$) در بلور نفوذ می‌کنند. بنابراین توزیع الکترونهای پراکنده شده فقط در مورد ناحیه‌ای از بلور که در فاصلهٔ حدود دو برابر قطر اتمی از سطح قرار می‌گیرد اطلاعاتی ارائه می‌دهد. از این رو از پراکندگی الکترون برای مطالعه سطوح جامدها استفاده می‌شود.

الکترونها، با یک انرژی خوش تعریف از مرتبهٔ $100eV$ با شتاب دادن الکترونهای حاصل از یک رشتهٔ داغ به آسانی به وجود می‌آیند. این الکترونها را می‌توان با طور الکتروستاتیکی یا مغناطیسی بر روی سطح مورد مطالعه کانونی کرد. انتخاب آشکارساز توسط بایست‌های آزمایش تعیین می‌شود. در مورد آزمایشهای ***پراش*** الکترون، آشکارساز باید الکترونهایی را که به طور ناکشسان پراکنده می‌شوند حذف کند (معمولاً اکثریت الکترونها) و اندازه‌گیری توزیع زاویه‌ای الکترونهایی را که به طور کشسان پراکنده می‌شوند مجاز دارد. در آزمایشهای ***پراکندگی ناکشسان***، توزیع انرژی الکترونهای پراکنده شده باید تعیین شود. استفادهٔ گسترده از الکترونها برای مطالعات سطح به گسترش تعدادی پیکربندی تجربی استاندارد منجر شده است، که برخی از آنها را در زیر شرح می‌دهیم. مطالعات سطح برای مقاصد فن‌آوری بسیار مهم‌اند؛ برای مثال در فیزیک نیمرسانا، خوردگی و کاتالیز ماهیت سطح، نقش مهمی ایفاء می‌کند.

برای مطالعات فیزیک سطح مطلوب است که بتوان یک سطح «پاک» تهیه کرد. چنین

سطحی معمولاً بسیار واکنشگر است و اتمها و مولکولهایی که به آن برخورد می‌کنند تمایل دارند به آن بچسبند، فرایندی که معروف به **جذب سطحی** است. حتی اگر جامد در یک ظرف خلاء قرار داشته باشد باز یک لایهٔ کثیف، به ضخامت یک اتم با سرعت بسیار زیاد می‌تواند بر روی سطح آن تشکیل شود (مسئلهٔ ۱۲-۷). برای اینکه یک سطح را به مدت کافی «پاک» نگهداریم، به فشاری در گسترهٔ $۱۰^{-۱۲}$ ـ $۱۰^{-۱۳}$ اتمسفر نیاز داریم؛ این ناحیه از فشار به **خلاء فرابالا**[1] (*UHV*) معروف است. در چنین فشارهای پایین پراکندگی الکترونها توسط مولکولهای گاز نیز متوقف می‌شود.

روشهای متعددی برای تهیهٔ یک سطح پاک، به کار رفته است. برخی بلورها را می‌توان در داخل دستگاه *UHV* رخ‌زنی کرد. روش دیگر بمباران سطح توسط یونهای گاز، با انرژی از مرتبهٔ $۱۰^{-۲}$ تا $۱۰^{۳}eV$ است که لایه‌های سطحی ناخالص را می‌فرساید. به تازگی توسط شگرد رونشستی باریکهٔ مولکولی (بخش ۶-۶) تحت شرایط *UHV* سطوح از نظر شیمیایی خالص تهیه شده است. شگردهای دیگری نیز در دسترس‌اند.

استفاده از شگردهای پراکندگی الکترون برای بررسی سطوح، شبیه استفاده از نوترونها برای بررسیهای درون بلورهاست که قبلاً در این فصل توصیف شد. بنابراین ساختار بلور دو بعدی که از اتمهای سطح تشکیل می‌شود را می‌توان با استفاده از **پراش الکترون با انرژی پایین**[2] (*LEED*)[3] مورد بررسی قرار داد. جهتهای باریکه‌های پراشیده توسط روایت دو بعدی نظریهٔ ارائه شده در بخش ۱۱-۲ ، به شبکه مربوط می‌شوند؛ محاسبهٔ شدت باریکه‌ها برای الکترونها، به دلیل لزوم منظورکردن پراکندگی چندگانه مشکلتر است.

بررسیهای پراکندگی ناکشسان الکترون، اطلاعاتی در بارهٔ طیف انرژی برانگیختگی‌های جایگزیده در سطح ارائه می‌دهد؛ شگرد انجام این کار به عنوان **طیف سنجی اتلاف انرژی با توان تفکیک بالا** (*HREELS*[4] یا گاهی فقط *EELS*) مشهور است. مثالی از یک برانگیختگی سطحی مد ارتعاشی مولکولی است که جذب سطح شده است، در نتیجه *HREELS* می‌تواند آلودگی شیمیایی سطح را آشکار کند. *HREELS* نوعاً اتلافهای انرژی الکترونی تا حدود $۱eV$ را در الکترونهای با انرژی $۵eV$ بررسی می‌کند.

ترکیب شیمیایی سطح را می‌توان توسط **طیف سنجی الکترون اوژه** (*AES*) نیز بررسی کرد. در این شگرد یک الکترون فرودی با انرژی نوعی $۳keV$ با برخورد الکترونی را از یک حالت

۱- *Ultra High Vacuum*

۲- پراش الکترونهای با انرژی از مرتبهٔ $۱۰۰eV$ برچسب انرژی پایین می‌گیرد تا از **پراش الکترونهای با انرژی بالا** (*HEED*)، که الکترونهای با انرژی از مرتبهٔ $۱۰keV$ را به کار می‌برد، متمایز باشد.

۳- *Low-Energy Electron Diffraction* ≡ *LEED*

۴- *High-Resolution Energy Los Spectroscop* ≡ *HREELS*

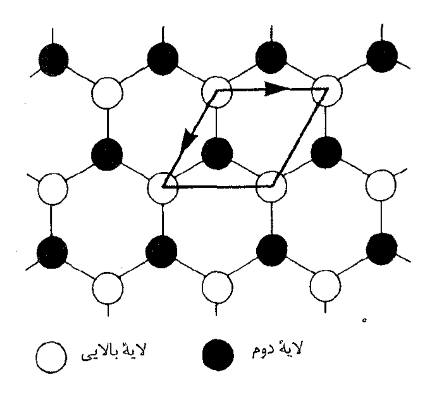
پوستهٔ درونی کنده و یک اتم واقع بر سطح را برانگیخته می‌کند. سپس حفرهٔ حاصل در پوستهٔ درونی توسط الکترونی که از تراز بالاتر سقوط می‌کند پر می‌شود؛ انرژی از دست داده شده توسط این الکترون می‌تواند یا به صورت یک فوتون[1] یا با گسیل یک الکترون ثانوی رها شود. امکان دوم فرایند اوژه است و در AES توزیع انرژی الکترونهای گسیل شده اندازه‌گیری می‌شود. مثالی از فرایند اوژه عبارت است از پر کردن یک تهی جای پوستهٔ K توسط الکترونی از پوستهٔ L (این الکترون انرژی $\Delta E = E_L - |E_K|$ را از دست می‌دهد) همراه با گسیل الکترونی از پوستهٔ M با انرژی جنبشی $|E_M| - \Delta E =$. از آنجا که انرژی حالتهای پوستهٔ درونی از عنصری به عنصر دیگر تغییر می‌کند، تشخیص عناصر روی سطح و غلظتهای تقریبی آنها با استفاده از طیف گسیل اوژه امکانپذیر است.

یکی از سطوح بلوری که بیش از همه مورد بررسی بوده است سطح (۱۱۱) سیلیسیم است. پیوستگی ساختار حجمی سیلیسم تا این سطح، ساختار نشان داده شده در شکل ۱۲-۱۱ را پیشنهاد می‌کند (با شکل ۱-۱۵ (ب) که یک برهٔ (۱۱۱) از این بلور را نشان می‌دهد مقایسه کنید). هر یک از اتمهای سطح در شکل ۱۲-۱۱ دارای یک «پیوند معلق» است و چنین سطحی خواهان کاهش انرژی خود توسط کاستن از تعداد این پیوندها است. این فرایند با عنوان **بازسازی** معروف است و متضمن انتقالی در مکان اتمها در نزدیکی و روی سطح است. کم شدن انرژی مربوط به کاهش تعداد پیوندهای کامل نشده توسط انرژی کرنش اضافی مربوط به اعوجاج ساختار زیر سطح موازنه می‌شود.

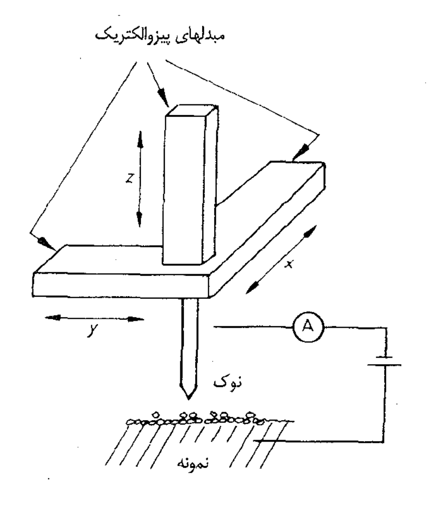
با استفاده از $LEED$ بیش از یک بازسازی منظم در سطح (۱۱۱) Si مشاهده شده است. بازسازیهای متفاوت توسط ابعاد یاختهٔ یکّهٔ دو بعدی ساختار سطح مشخص می‌شوند. این بازسازیها به تناسب برحسب تعداد واحدهای تکرار یاختهٔ بازسازی نشده مشخص می‌شوند. اعتقاد بر این است که پایدارترین ساختار سطح پاک (۱۱۱) سیلیسیم یک بازسازی ۷×۷ است؛ فاصلهٔ تکرار در ساختار بازسازی شده هفت برابر یال یاختهٔ یکّهٔ بازسازی نشده در امتداد هر دو محور بلورشناسی است.

با وجودی که ساختار ۷×۷ بازسازی سطح Si(۱۱۱) توسط $LEED$ تعیین شده است، مؤثرترین تأیید این ساختار به وسیلهٔ **میکروسکوپ تونل‌زن روبشی** (STM) به دست آمده است. این دستگاه دیگری است که از الکترونها برای بررسی سطوح استفاده می‌کند، البته در آن صرفاً پراکندگی نیست که مطرح می‌شود. در STM (شکل ۱۲-۱۲) الکترونها از میان گاف کوچک بین یک نوک تیز تنگستن و سطح مورد بررسی به گونهٔ مکانیک کوانتومی تونل می‌زنند.

۱- طیف فوتونهای گسیل شده شامل همان اطلاعات الکترونهای اوژه است. بررسی طیف فوتون به عنوان طیف سنجی پتانسیل ظاهر (*Appearance Potential Spectroscopy, APS*) معروف است.



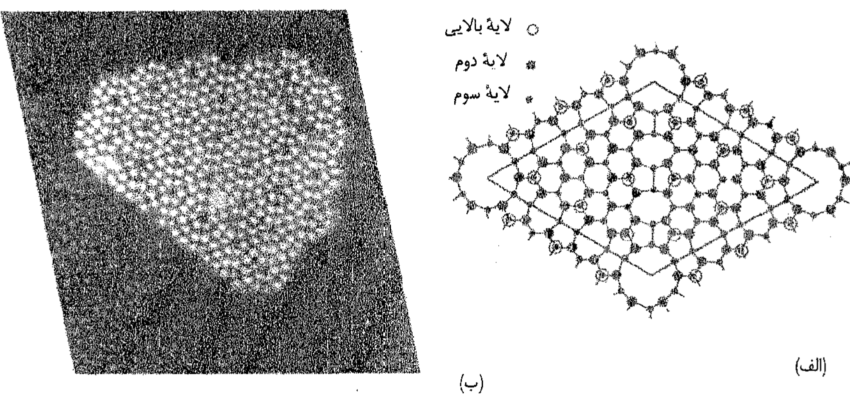
شکل ۱۲-۱۱ : نمای سطح (۱۱۱) بازسازی نشدهٔ سیلسیم. هر اتم در لایهٔ بالایی فقط سه پیوند کووالان تشکیل می‌دهد؛ پیوند چهارم در جهت عمود بر کاغذ به هنگام تشکیل سطح شکسته می‌شود. یاختهٔ یکّه ساختار سطح دو بعدی نشان داده شده است.



شکل ۱۲-۱۲ نمودار طرحوار میکروسکوپ روبشی تونل‌زن. مبدلهای پیزوالکتریک حرکت در جهتهای x، y و z را توسط کاربرد میدانهای الکتریکی میسر می‌سازند.

مبدلهای پیزوالکتریک محل این نوک را تنظیم می‌کنند. شعاع مؤثر نوک نوعاً ۱۰ Å است و گاف بین سطح و نوک نیز از همین مرتبه است. اگر نوک به موازات سطح جابه‌جا شود بسته به اینکه نوک در بالای یک اتم روی سطح و یا در فضای بین اتمها قرار گیرد جریان تونل‌زن تغییر می‌کند؛ به عبارت دقیق‌تر، جریان با چگالی الکترونی روی سطح تغییر می‌کند. از این رو تغییرات جریان نمایهٔ سطح را با جداکنندگی اتمی اندازه می‌گیرد.

در حقیقت مد متداول عمل چنین است که همراه با حرکت کاوشگر در سرتاسر سطح از بازخور برای تغییر فاصلهٔ بین نوک و سطح به منظور ثابت نگهداشتن جریان تونل‌زن استفاده می‌کنیم؛ در نتیجه سیگنال باز خور اطلاعات روی سطح را در بر دارد. شکل ۱۲-۱۳ (ب) نشانگر تصویر ۷×۷ سطح Si(۱۱۱) است که با استفاده از STM به دست آمده است. شکل ۱۲-۱۳ (الف) ساختار اتمی پیچیدهٔ این سطح را نشان می‌دهد؛ در مورد جزئیات نباید خیلی نگران باشید و باید توجه کنید که سطح بازسازی شده به طور قابل ملاحظه‌ای با سطح بازسازی



شکل ۲-۱۳: بازسازی ۷×۷ سطح (۱۱۱) سیلسیم. (الف) مکان اتمها در سه لایهٔ نخست. باید بررسی کنید که اتمهای لایهٔ بالایی در مکانهای نشان داده شده توسط تصویر *STM* است. (ب) تصویر *STM* از سطح ناحیهٔ روشن کسر جزیره‌ای واقع بر سطح به ضخامت یک لایه است. لکه‌های سفید مکانهای بالاترین لایهٔ اتمهاست. (اقتباس با اجازه از *D. King, Phyics World, March 1989, p. 45*)

نشدهٔ شکل ۱۲-۱۱ فرق می‌کند.

اختلاف بین روشهای *LEED* و *STM* برای تعیین ساختارهای سطح، جالب توجه است. جهتهای باریکه‌های پراشیده در *LEED* اساساً تعیین شبکهٔ ***وارون*** دو بعدی ساختار سطح را از طریق استفاده از هم‌ارز دو بعدی معادلهٔ (۱۱-۸) مقدور می‌سازد. روش *STM* تعیین مستقیم ساختار ***فضای حقیقی*** را میسر می‌سازد.

از روش *STM* فقط برای مطالعهٔ سطوح جامدهای رسانا می‌توان استفاده کرد. دستگاهی که می‌تواند برای بررسی سطوح عایقها به کار رود **میکروسکوپ نیروی اتمی** *(AFM)* است. در *AFM* یک کاوشگر با نوک تیز بر روی میلهٔ معلقی قرار داده می‌شود و همچنان که نوک سرتاسر نمونه را روبش می‌کند، این کاوشگر تغییرات در نیروی بین سطح و نوک مورد مطالعه را بهینه می‌کند؛ با استفاده از این شگرد جداکنندگی اتمی نیز امکان‌پذیر است[1].

در این بررسی از روشهایی که برای مطالعهٔ سطوح از الکترون استفاده می‌کنند، فقط بخش کوچکی از شگردهای در دسترس برای این منظور را بیان کرده‌ایم. همان طوری که خوانندگان نتیجه‌گیری کرده‌اند، زمینهٔ مطالعات سطح پر است از واژه‌های اختصاریی که از حروف اول

۱- برای جزئیات بیشتر در بارهٔ *STM*، *AFM* و دیگر دستگاههای مربوط به کاوش سطوح با جداکنندگی اتمی به مقالهٔ زیر مراجعه کنید:

'Scanned probe microscope' by H.K. Wickramasinghe in Scientific American, October 1989.

جدول ۱۲-۱: برخی از شگردهایی که در مطالعهٔ سطوح جامدها به کار می‌روند

شگرد	واژهٔ اختصاری	شرح	مثالهایی از کاربرد
پراش الکترون با انرژی پایین	*LEED*	پراکندگی کشسان الکترونهای $\sim 100 eV$	تعیین ساختار سطح
پراش بازتاب الکترونهای با انرژی بالا	*RHEED*	پراکندگی الکترونهای با انرژی $\sim 30 keV$ در فرود خراشان	توپوگرافی سطح رشد بلور
طیف‌سنجی اتلاف انرژی الکترون با جداکنندگی بالا	*HREELS*	پراکندگی ناکشسان الکترونهای $\sim 5 \; eV$	ارتعاشات سطحی خصوصاً برای ملکولهایی که جذب سطحی شده‌اند.
طیف‌سنجی اوژه	*AES*	گسیل الکترون ثانوی پس از برانگیختگی الکترون پوستهٔ درونی توسط الکترون با انرژی $\sim 3 keV$	ترکیب شیمیایی سطح
طیف سنجی پتانسیل ظاهر	*APS*	گسیل فوتونهای پرتو X پس از برانگیختن الکترون پوستهٔ درونی توسط الکترون $\sim 3 keV$	ترکیب شیمیایی سطح
طیف سنجی گسیل فوتونی فرابنفش (پرتو X)	*UPS* (*XPS*)	گسیل الکترونها ناشی از فوتونهای فرابنفش (پرتو X)	توزیع انرژی الکترونهای سطح
طیف سنجی گسیل فوتونی وارون	*IPS*	گسیل فوتون که توسط الکترونها فرودی $10-100 eV$ به وجود آید	انرژیهای حالتهای الکترونی **اشغال نشدهٔ** سطحی
ساختار ریز جذب سطحی گستردهٔ پرتو X	*XEXAFS*	جذب پرتوهای X برحسب انرژی	محیط اطراف موضعی اتمهای سطح را تعیین می‌کند
میکروسکوپی روبشی تونل‌زن	*STM*	تونل‌زدن الکترونها از نوک تنگستن به سطح نمونه	تغییر چگالی حالتهای موضعی الکترون را اندازه‌گیری می‌کند
میکروسکوپی نیروی اتمی	*AFM*	نیروی بین نوک ریز و سطح را اندازه‌گیری می‌کند.	بررسی سطح عایقها

کلمات دیگری ترکیب شده‌اند. برای اینکه خواننده بتواند این اصطلاحات مخصوص را فراگیرد، واژه‌های اختصاری و جزئیات مختصری از مهم‌ترین شگردها در جدول ۱۲-۱ فهرست گردیده‌اند. یک مشکل در مورد مطالعات سطح آن دست که فقط کسر کوچکی از اتمهای موجود در حجم نمونه بر روی سطح یا در مجاورت آن قرار می‌گیرند. بنابراین ذراتی که به عنوان کاوشگر برای بررسی سطح به کار می‌روند یا باید به اتمهای سطح به طور بسیار قوی برهم‌کنش کنند (همان طور که در مورد الکترونها چنین است) یا در باریکه‌هایی با شدت بسیار بالا موجود باشند تا مقدار کوچکی از پراکندگی مربوط به سطح بتواند آشکار شود. شدتهای بالای موجود در چشمه‌های سنیکروترونی به احیای استفاده از پرتوهای X برای کاوش سطوح منجر شده است.

مسایل ۱۲

۱۲-۱ (الف) وابستگی عامل شکل اتمی f به زاویهٔ پراکندگی را برای پراکندگی پرتوهای X با طول موج λ از یک اتم محاسبه کنید. فرض کنید اتم، توزیع شده‌اند. Z الکترون دارد که به طور یکنواخت درون کره‌ای به شعاع نقطه‌ای درون اتم با R فرض کنید که سهم موج پراکنده شده از چگالی الکترون در آن نقطه متناسب است.

(ب) وابستگی زاویه‌ای پراکندگی مغناطیسی نوترونها از یک گشتاور مغناطیسی اتمی μ را محاسبه کنید. فرض کنید که سهم ناشی از نقطه‌ای درون اتم با چگالی گشتاور مغناطیس موضعی متناسب است و این گشتاور مغناطیسی بر روی ***یک سطح کروی*** به شعاع R به طور یکنواخت توزیع شده است و در دیگر جاها صفر است. این تقریب غالباً منطقی است زیرا گشتاور اتمی به پوستهٔ به خصوصی از الکترونها (برای مثال $3d$ یا $4f$) مربوط می‌شود.

۱۲-۲ نوترونهای با انرژی $0/02eV$ تحت زاویهٔ $10°$ از هلیوم جامد پراکنده می‌شوند و یک فونون گسیل می‌کنند (سرعت صورت = $300ms^{-1}$). اتلاف انرژی نوترونها را برآورد کنید. زمان پرواز نوترونهای پراکنده شده و پراکنده نشده در مسیری به طول $10m$ چقدر است؟

چرا آزمایش پراکندگی با زاویهٔ کوچک از این نوع برای بلوری چون یاقوت کبود، که برای آن سرعت صوت ($10^4 ms^{-1}$) از سرعت نوترونها بزرگتر است عملی نخواهد بود؟ برای بررسی طیف فونونی یاقوت کبود چگونه از نوترونها استفاده می‌کنید؟

۱۲-۳ نشان دهید که داده‌های شکل ۱۲-۳ با ساختار سیلیسم سازگارند و ابعاد یاختهٔ یکّه را حساب کنید.

۱۲-۴ در شکل ۱۲-۷، G_{100}، G_{110} و G_{111} را محاسبه کنید و در مورد محل مرزهای منطقهٔ

اول بریلوئن توضیح دهید. با منظور کردن اینکه یاختهٔ یکّهٔ bcc پتاسیم دارای $a = ۵/۲۳\ \text{Å}$ است، با استفاده از داده‌های شکل، سرعتهای امواج صوتی عرضی و طولی را در جهتهای [۱۰۰]، [۱۱۱] و [۱۱۰] محاسبه کنید.

توضیح دهید چرا:

(i) وقتی $\mathbf{q} = \frac{۱}{۲}\ \mathbf{G}_{۱۰۰}$، مدهای T و L تبهگن‌اند،

(ii) انتهای طرف راست (الف) با انتهای طرف چپ (ب) همانندند،

(iii) شیب منحنیهای پاشندگی در مرز منطقهٔ اول بریلوئن در (ب) صفر نمی‌شود.

۱۲-۵ دیسپروزیوم فلزی ساختار شش گوشی دارد. تأیید شده است که گشتاورهای اتمی در صفحهٔ قاعده به گونهٔ فرومغناطیسی به صف در می‌آیند، ولی جهت صف‌آرایی از یک لایه به لایهٔ بعدی به اندازهٔ زاویه‌ای از مرتبهٔ ۴۰° حول محور c می‌چرخد. برای تأیید این موضوع چه نوع آزمایشهای پراکندگی نوترون انجام می‌دهید و چه نتایجی را انتظار دارید؟

۱۲-۶ با در نظر گرفتن (الف) یاختهٔ یکّهٔ مغناطیسی و (ب) یاختهٔ یکّهٔ شیمیایی، شاخصهای میلر بازتابهای مغناطیسی در $۱۱/۹^\circ$ ، $۳۰/۲^\circ$ و $۳۶/۴^\circ$ در شکل ۱۲-۸ را مشخص کنید.

۱۲-۷ زمانی را که طول می‌کشد تا تک‌لایه‌ای از مولکولهای اکسیژن در دمای اتاق بر روی سطحی که در معرض گاز اکسیژن با فشار (الف) $۱\ bar$ ، (ب) $۱۰^{-۶}\ bar$ و (ج) $۱۰^{-۱۲} bar$ قرار گرفته است و جذب سطحی شود را برآورد کنید ($۱ bar = ۱۰^{۵}\ Nm^{-۲}$).

هر چه زیرکتر باشید و بیشتر بدانید زندگی مشکل‌تری دارید.
کاترین هپبرن (۱۹۸۷)



فلزات واقعی

۱۳-۱ مقدمه

در فصل ۴ در بارهٔ اثر پتانسیل دوره‌ای شبکه بر حالتهای الکترونی در فلزات یک و دو بعدی بحث شد، و در فصل ۱۱ شکل عام برای تابع موج الکترون در بلور را به دست آوردیم و پیامدهای این تابع موج در رابطهٔ پاشندگی الکترون را مورد بحث قرار دادیم. در این فصل اطلاعات به دست آمده در آن دو فصل راترکیب می‌کنیم تا در بارهٔ خواص الکترونها در فلزات واقعی بحث کنیم. علاوه بر آن، در بخش ۱۳-۵ ، به طور ساده توضیح می‌دهیم که چرا، علی‌رغم دافعهٔ کولنی بین الکترونها رهیافت الکترون مستقل جوابهای منطقی می‌دهد

۱۳-۲ سطحهای فرمی

۱۲-۲-۱ سطح فرمی در یک فلز الکترون تقریباً آزاد دو بعدی

طبق پیش‌بینی مدل الکترون آزاد بسیاری از خواص فلزها توسط الکترونهای مجاور سطح فرمی تعیین می‌شود. وقتی که اثر پتانسیل دوره‌ای شبکه را منظور کنیم نیز وضعیت بر همین منوال خواهد بود. بنابراین اطلاع از هندسهٔ سطح فرمی در هر محاسبهٔ خواص فلز، اساسی است. گرچه توابع موج الکترونها شباهتی به توابع موج الکترونهای آزاد ندارند (بخش ۴-۳-۳)، ولی انرژی الکترونها ممکن است به انرژیهای الکترونهای آزاد نزدیک باشند؛ لذا رهیافت الکترون تقریباً آزاد (بخش ۴-۱) را می‌توان برای پیش‌بینی هندسهٔ سطح فرمی به کار برد. دیده می‌شود که این روش حتی وقتی تقریب خوبی از انرژی نمی‌دهد هم غالباً توپولوژی

سطح را درست ارائه می‌کند.

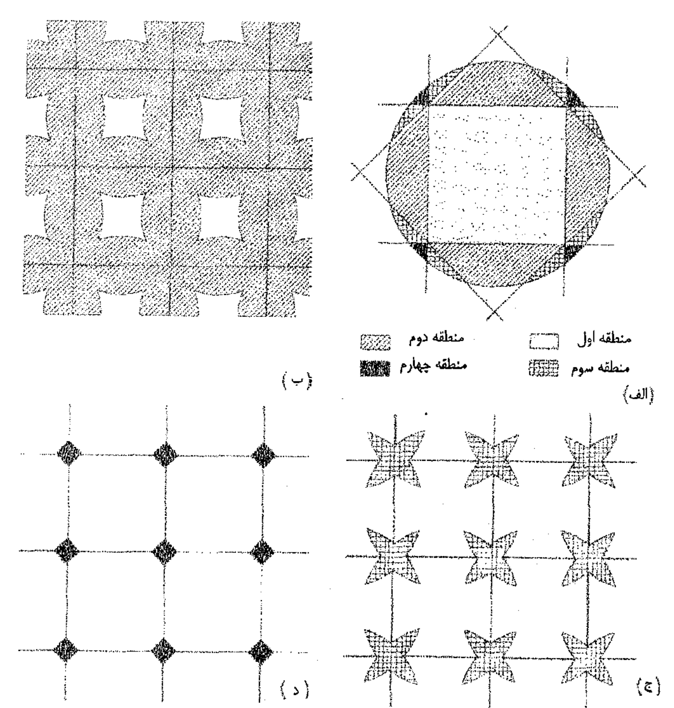
این رهیافت را قبلاً در بخش ۴-۱ برای تولید سطح فرمی در یک فلز دو بعدی دو ظرفیتی با ساختار بلوری مربعی ساده به‌کار برده‌ایم؛ سطح فرمی در طرح منطقه‌ای گسترده در شکل ۴-۵ (ب) و در طرح منطقه‌ای تکراری در شکل ۴-۱۰ نشان داده شده است. همچنین از نظریهٔ الکترون تقریباً آزاد برای تولید پربندهای انرژی ثابت در شکل‌های ۱۱-۱۳، ۱۱-۱۴ و ۱۱-۱۵ برای یک فلز دوبعدی با شبکهٔ وارون مربعی ساده استفاده کرده‌ایم. برای پیش‌بینی سطح فرمی نیاز است که پربند انرژی ثابتی را مشخص کنیم که درست حاوی آن تعداد حالتهای الکترونی باشد که تمام الکترونهای رسانش را در خود جای دهد. پربندهای انرژی ثابت در فلز دوبعدی در طرح منطقه‌ای گسترده در شکل ۱۱-۱۳ به دایره‌های الکترون آزاد نزدیک هستند و بنابراین سطح فرمی نزدیک به سطح فرمی الکترون آزاد است. بنابراین برای به دست آوردن یک سطح فرمی تقریبی تنها لازم است دایره‌ای با شعاع مناسب به مرکز منطبق بر مبداء فضای وارون رسم شود.

شعاع مناسب به تناسب با مشخص کردن مساحت دایره به صورت مضربی از مساحت منطقهٔ اول بریلوئن به دست می‌آید. از بخش ۱۱-۴-۱ می‌دانیم که، در بلوری با N_c یاختهٔ بسیط، منطقهٔ اول بریلوئن حاوی $2N_c$ حالت الکترونی است (یادآور می‌شویم که الکترون دو حالت اسپینی دارد). بنابراین، به عنوان مثال، در یک فلز دو بعدی با چهار الکترون رسانش در هر یاختهٔ بسیط، سطح فرمی الکترون آزاد دایره‌ای با مساحتی دو برابر مساحت منطقهٔ اول بریلوئن است. این دایره به همراه مرزهای منطقه‌های بریلوئن برای یک شبکهٔ وارون مربعی ساده در شکل ۱۳-۱ (الف) نمایش داده شده است (مانند شکل ۱۱-۱۱). هاشورهای متفاوت منطقه‌هایی را مشخص می‌کنند که الکترونهای موجود در سطح فرمی به آنها تعلق دارند.

در بخش ۱۱-۴-۲ نشان دادیم که با انتقال پربندهای انرژی به اندازهٔ بردارهای شبکهٔ وارون مناسب، می‌توانیم آنها را از هر منطقهٔ بریلوئن در شکل ۱۱-۱۳ دوباره ترسیم کنیم و یک ساختار دوره‌ای در فضای k مانند شکل ۱۱-۱۵ به دست آوریم. شکلهای ۱۳-۱ (ب) - (د) بخشهایی از سطح فرمی الکترون آزاد موجود در مناطق دوم، سوم و چهارم بریلوئن شکل ۱۳-۱ (الف) را نشان می‌دهند که به همین شیوه در طرح منطقه‌ای دوره‌ای رسم شده‌اند[1]. در شکلهای ۱۳-۱ (ج) و (د) بسته‌هایی از حالتهای اشغال شده داریم، به این بخشهای سطح فرمی، الکترون‌گونه می‌گوییم؛ در شکل ۱۳-۱ (ب) بسته‌هایی از حالتهای اشغال نشده وجود دارد، این بخشهای سطح فرمی حفره‌گونه‌اند. دلیل این نمادگذاری در بخش ۱۳-۴ روشن خواهد شد. شکل ۱۳-۲ روشی را نمایش می‌دهد که در آن بخشهای سطح فرمی در شکلهای ۱۳-۱ (ب) -

---

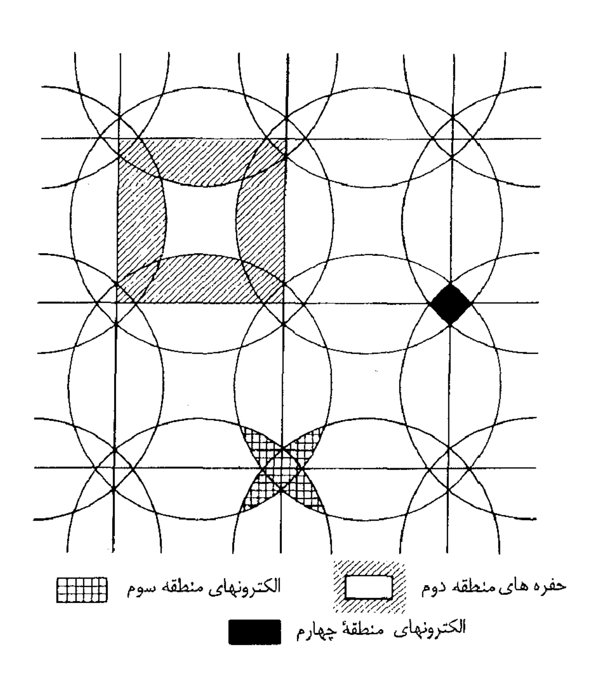
۱- در مثال مورد نظر سطح فرمی منطقهٔ اول بریلوئن را قطع نمی‌کند.



شکل ۱۳-۱ : (الف) دایرهٔ فرمی الکترون آزاد در یک فلز دو بعدی با چهار الکترون رسانش به ازای یاختهٔ رسانش که بر روی مناطق بریلوئن یک شبکهٔ وارون مربعی ساده نهاده شده است. بخشهایی از دایره که به مناطق اول، دوم، سوم و چهارم مربوطاند مشخص شده‌اند. با انتقال دایرهٔ فرمی توسط بردارهای شبکهٔ وارون مناسب می‌توان آن را در طرح منطقه‌ای تکراری به گونه‌ای رسم کرد که : (ب) سطح فرمی حفره‌گونه در منطقهٔ دوم، (ج) سطح الکترون گونه در منطقه سوم و (د) سطح الکترون گونه در منطقهٔ چهارم حاصل شوند.

(د) به دست می‌آیند. در این روش دایره‌هایی به مرکز تمامی نقاط شبکهٔ وارون با شعاع مساوی شعاع دایرهٔ فرمی الکترون آزاد رسم می‌شوند؛ این مبنای **سازهٔ هاریسون** برای ساختن سطح فرمی الکترون آزاد است.

سازهٔ هاریسون سرراست‌ترین شیوهٔ ساختن سطح فرمی الکترون آزاد در یک فلز سه بعدی است و این روش را به همین منظور در قسمت بعدی به کار خواهیم برد. برای فهم این سازه، استفاده از آن را برای مورد دو بعدی توضیح می‌دهیم. در ابتدا توجه می‌کنیم که دایره‌های شکل ۱۳-۲ فضای $\mathbf{k}$ را به ناحیه‌هایی تقسیم می‌کنند که توسط یک، دو، سه و چهار دایره پوشانده شده‌اند. سطح فرمی الکترون آزاد با به کارگیری قواعد زیر حاصل می‌شود:



شکل ۱۳-۲ : سازهٔ هاریسون برای به دست آوردن نمایش منطقه‌ای تکراری سطح فرمی فلز الکترون آزاد دو بعدی شکل ۱۳-۱

(۱) سطح فرمی در منطقهٔ nام بریلوئن مرزی است که نواحی پوشانده شده توسط n دایره و $n-1$ دایره را از یکدیگر تفکیک می‌کند.

(۲) اگر ناحیهٔ پوشانده شده با تعداد دایره‌های بیشتر درون این مرز قرار گیرد یک سطح فرمی الکترونی، و اگر در بیرون باشد، یک سطح فرمی حفره‌ای داریم.

خواننده لازم است بیازماید که با به کار بستن این قواعد واقعاً سطح فرمی در هر منطقهٔ مطابق شکل ۱۳-۲ مشخص شود.

تعیین بخش‌های مختلف سطح فرمی الکترون آزاد در مناطق بریلوئن مختلف تنها زمانی اهمیت پیدا می‌کند که گافهای انرژی ناشی از پتانسیل دوره‌ای شبکه در مرز مناطق بریلوئن در نظر گرفته شود. در این صورت بخشهای سطح فرمی در مناطق مختلف به نوارهای انرژی مختلف مربوط می‌شوند. طبق نظریهٔ الکترون تقریباً آزاد، سطح فرمی، کمی از سطح فرمی مربوط به الکترون آزاد تغییر می‌کند به گونه‌ای که مرز مناطق بریلوئن را به طور عمود قطع کند (شکل ۱۱-۱۳). مقایسهٔ شکل ۱۳-۱ (الف) با شکل ۱۱-۱۳ نشان می‌دهد که این تغییر باعث گرد شدن نقاط تیز سطح فرمی در شکل‌های ۱۳-۱ (ب) - (د) می‌شود. با وجود این گرد شدن،

سطح فرمی مربوط به هر منطقه مشخصهٔ بسیار غیر دایره‌ای دارد. افزایش اختلال ناشی از پتانسیل شبکه باعث کوچکتر شدن هر دوی نواحی الکترونی و حفره‌ای در سطح فرمی می‌شود. یک اختلال به اندازهٔ کافی قوی سطح فرمی را از یک منطقه به خصوص کاملاً حذف می‌کند. وقتی که تعداد زوجی الکترون در یاختهٔ بسیط موجود باشد، نتیجهٔ نهایی این فرایند، دستیابی به عایقی بدون سطح فرمی آزاد می‌شود؛ لذا برای چهار الکترون در یاختهٔ بسیط، اولین دو منطقهٔ بریلوئن پروتمامی نواحی دیگر خالی هستند.

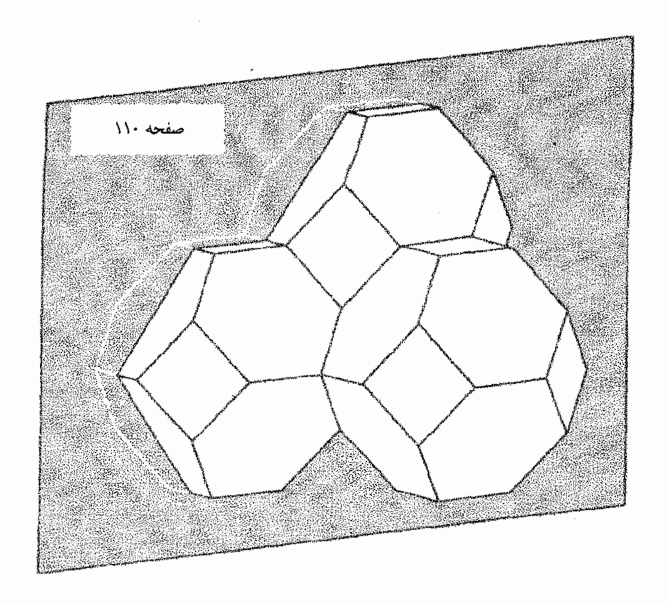
۱۳-۲-۲ سطح فرمی در فلزهای سه بعدی

گسترش رهیافت هاریسون به سه بعد سرراست است. کره‌ای با حجم مساوی کرهٔ فرمی الکترون آزاد به مرکز هر نقطه از شبکه وارون رسم می‌شود و دو قاعدهٔ بخش قبل در نواحی همپوشانی اعمال می‌شوند. برای نمایش این رهیافت مورد خاص یک فلز مکعبی تنک پکیده با چهار الکترون رسانش در یاختهٔ واحد (برای مثال، سرب) را در نظر می‌گیریم[1].

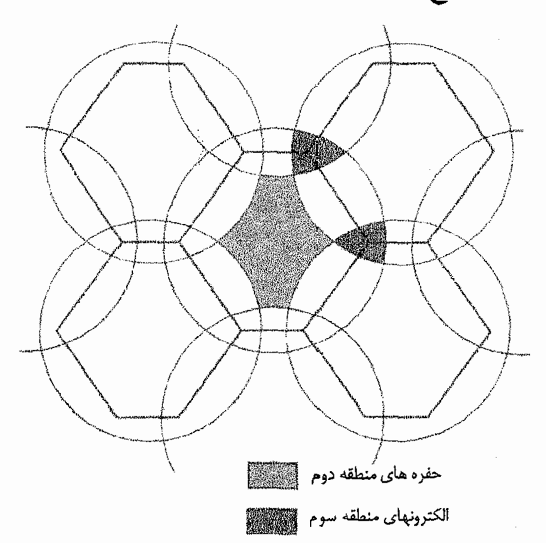
اولین منطقهٔ بریلوئن در شبکهٔ ***وارون*** مکعبی مرکز حجمی، هشت وجهی بریده شدهٔ شکل ۱-۱۲ (ب) است. حجم کرهٔ فرمی الکترون آزاد دو برابر حجم منطقهٔ اول بریلوئن است؛ این به آن معناست که کرهٔ فرمی به اندازه‌ای بزرگ است که تنها منطقهٔ اول را به طور کامل در بر می‌گیرد. دو کره در مجاورت وجوه منطقه همپوشانی دارند، سه کره در مجاورت لبه‌ها و چهار کره در مجاورت گوشه‌های منطقهٔ بریلوئن. بیشتر این ویژگیها روی یک سطح مقطع (۱۱۰) در فضای **k** همچون شکل ۱۳-۳ قابل مشاهده‌اند؛ منشاء یک سطح حفره در منطقهٔ دوم و یک سطح الکترون در منطقهٔ سوم در شکل ۱۳-۳ (ب) دیده می‌شود. سطح مقطع (۰۱۱) گوشه‌های منطقهٔ بریلوئن راکه حاوی بسته‌های کوچک الکترونی در منطقهٔ چهارم‌اند در برنمی‌گیرد.

شکل ۱۳-۴ نمای طرحوار سطح فرمی را پس از گرد شدن گوشه‌های تیز در اثر پتانسیل دوره‌ای شبکه نمایش می‌دهد. جالب‌ترین ویژگی سطح منطقهٔ سوم است که به "هیولا" معروف است. نمای سه بعدی روشن می‌سازد که این سطح را نمی‌توان با قطعیت یک سطح "الکترون" یا یک سطح "حفره" نامید چرا که یک سطح همبند چندگانه است؛ سطح مقطع‌هایی می‌توان رسم کرد که الکترون گونه (مانند شکل ۱۳-۳ (ب)) یا حفره گونه به نظر آیند. پیامدهای تجربی این نوع سطح فرمی را در بخش ۱۳-۴ بررسی می‌کنیم. توجه کنید که هیولاها در اصل محصول فضای سه بعدی‌اند؛ و در ابعاد کمتر نمی‌توانند وجود داشته باشند.

۱- برای دیدن تصاویری از سطوح فرمی که با سازهٔ هاریسون حاصل شده‌اند، به مأخذ زیر مراجعه کنید:
Pseudopotentials in the Theory of Metals by W. A. Harrison, Benjamin, New York (1966)

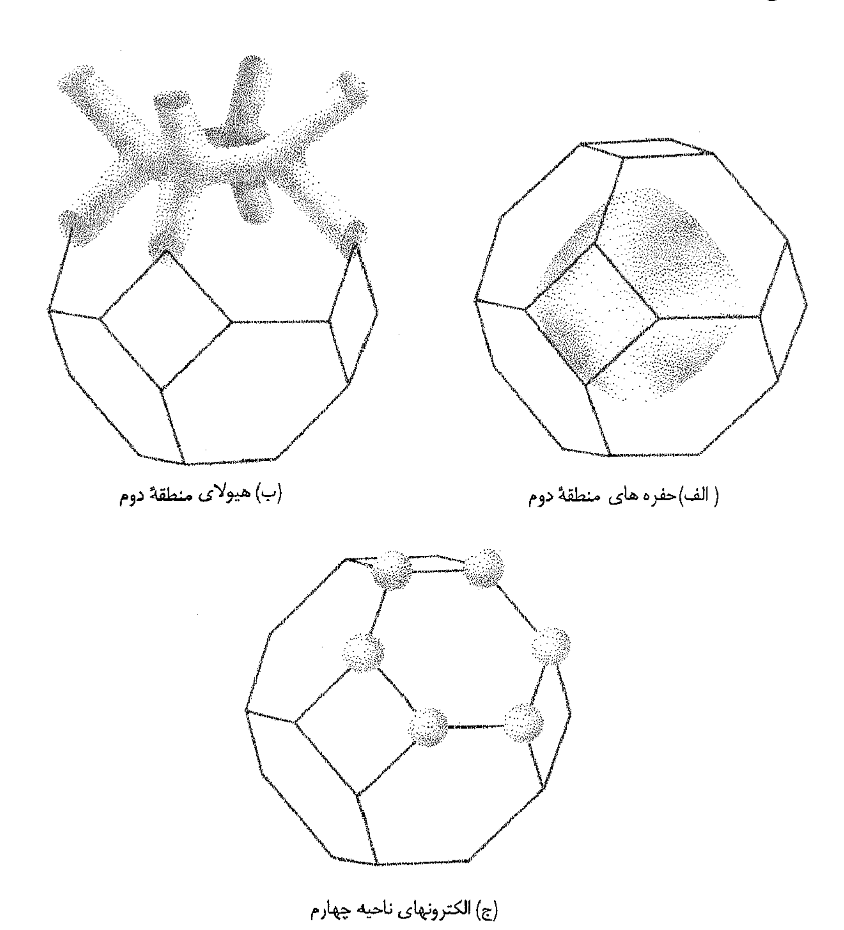


(الف) یاخته‌های ویگنرساتیس در شبکهٔ وارون مرکز حجمی مربوط به ساختار مکعبی تنک پکیده، متقاطع با یک صفحهٔ (۱۱۰)



(ب) سازهٔ هاریسون در یک صفحهٔ (۱۱۰) برای شبکهٔ وارون نوع (الف)، شعاع کره‌ها برای یک فلز مکعبی تنک پکیده با چهار الکترون رسانش به ازای هر اتم مناسب است.

شکل ۱۳-۳



(الف)حفره های منطقهٔ دوم

(ب) هیولای منطقهٔ دوم

(ج) الکترونهای ناحیه چهارم

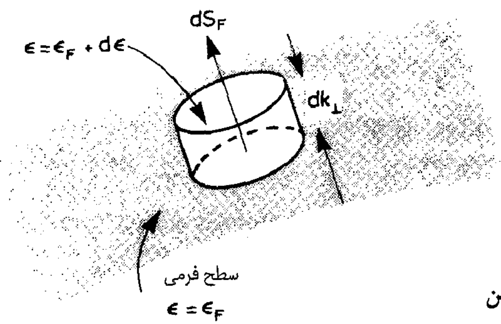
۱۳-۴: سطح فرمی برای یک فلز مکعبی تنک پکیده؛ چهار الکترون به ازای هر اتم، براساس پیش‌بینی رهیافت الکترون تقریباً آزاد.

۱۳-۲-۳ چگالی حالتها در سطح فرمی

تعدادی از خواص فلز فقط به چگالی حالتها در سطح فرمی بستگی دارند. به این ترتیب معادلهٔ (۳-۱۹)،

$$C_V = \frac{1}{3}\ \pi^2\ g(\varepsilon_F)\kappa_B^2\ \ T$$

به طور عام ظرفیت گرمایی الکترونی در دماهای پایین را می‌دهد. برای محاسبهٔ $g(\varepsilon_F)$ به طور عام، سطح انرژی ثابت $\varepsilon_F + d\varepsilon$ را در نظر می‌گیریم. این سطح به اندازهٔ فاصلهٔ عمودی $dK_\perp$



۱۳-۵: عنصر حجم در فضای k بین سطح فرمی و سطح انرژی $\varepsilon_F + d\varepsilon$

(شکل ۱۳-۵ را ببینید) از سطح فرمی جابه جا شده است

$$dk_\perp = \frac{d\varepsilon}{\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_\perp}\right)} = \frac{\partial\varepsilon}{\hbar\nu_F}$$

که در آن سرعت فرمی ν_F به عنوان سرعت گروه، $\hbar^{-1}\partial\varepsilon/\partial\mathbf{k}$، امواج الکترون در سطح فرمی تعریف می‌شود و به طور عام با تغییر مکان بر روی سطح فرمی تغییر می‌کند. برای عنصر مساحت سطح فرمی dS_F، همان طورکه در شکل ۱۳-۵ نشان داده شده است، حجم فضای **k** محصور بین دو سطح برابر است با $dk_\perp\, dS_F$. بنابراین حجم کل فضای k محصور بین این دو پربند برابر خواهد شد با :

$$\int dk_\perp \; dS_F = \int \frac{d\varepsilon}{\hbar\nu_F} \; dS_F$$

که در آن انتگرال بر روی سطح فرمی است[1]. با استفاده از معادله (۲-۴۱) در می‌یابیم که این حجم فضای **k** حاوی

$$\frac{V}{(2\pi)} \int \frac{d\varepsilon}{\hbar\nu_F} \; dS_F$$

حالتهای **k** است که در آن V حجم فلز است. بنابراین تعداد حالتهای الکترونی برای الکترونهای با هر دو نوع اسپین به ازای واحد گسترهٔ انرژی برابر است با

$$g(\varepsilon_F) = \frac{V}{4\pi^3} \int \frac{1}{\hbar\nu_F} \, dS_F \qquad (۱۳\text{-}۱)$$

۱- برای اجتناب از زیاده شماری حالتها، مساحت را می‌توان بر روی سطح فرمی در طرح منطقه‌ای گسترده و یا در طرح منطقه‌ای کاهش یافته توسط مجموعیابی بر روی نوارهای انرژی محاسبه کرد.

بنابراین با افزایش مساحت سطح فرمی، چگالی حالتها نیز افزایش می‌یابد، بیشترین سهم مربوط به آن نواحی از سطح است که کوچکترین سرعت فرمی را دارد. این نکته بزرگی ضرایب ظرفیت گرمایی الکترونی γ برای بعضی از فلزات واسط را توضیح می‌دهد؛ هر جا که انرژی فرمی در نوارهای باریک $3d$ قرار می‌گیرد، سرعت فرمی کوچک مربوط به این نوارها سهم بزرگی از چگالی حالتها را ارائه می‌کند.

۱۳-۳ دینامیک الکترونی در فلز سه بعدی

۱۳-۳-۱ معادلهٔ حرکت و جرم مؤثر

در بخش ۴-۴ نشان دادیم که معادلهٔ حرکت یک بسته موج الکترونی در بلور یک بعدی در حضور میدان الکتریکی، و در غیاب برخوردها با رابطهٔ (۴-۲۴) به صورت زیر داده می‌شود

$$\hbar \frac{dk}{d\varepsilon} = -eE$$

با تعویض k و E با مقادیر برداری آنها این رابطه به فضای سه بعدی تعمیم داده می‌شود (این تعمیم را قبلاً در فصل ۵ به کار برده‌ایم).

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e\,\mathbf{E} \qquad (۱۳-۲)$$

اثر برخوردها را در بخش ۱۳-۳-۲ مطرح می‌کنیم.

معادلهٔ (۱۳-۲) تغییر اندازه حرکت بلوری را با نیروی وارد بر الکترون مساوی قرار می‌دهد. وسوسه آنکه $\hbar\,\mathbf{k}$ را با اندازه حرکت الکترون برابر بگیریم، وجود دارد ولی این کار گمراه کننده است، زیرا تغییر اندازه حرکت ناشی از میدان به گونه‌ای بین الکترون و شبکه تقسیم می‌شود که عموماً تفکیک بدون ابهام آن مقدور نیست.

برای مشاهدهٔ این نکته اندازه حرکت واقعی یک الکترون با تابع موج بلوخ رابرآورد می‌کنیم، طبق معادلات (۱۱-۲۷) و (۱۱-۳۲) این تابع موج عبارت است از :

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{G}}(\mathbf{k})\, e^{i[(\mathbf{k}+\mathbf{G}).\mathbf{r} - \omega t]} \qquad (۱۳-۳)$$

این ویژه تابع اندازه حرکت نیست، اما می‌توانیم مقدار چشمداشتی اندازه حرکت را به صورت زیر محاسبه کنیم.

$$<\mathbf{p}_{el}> = \int dV\, \Psi^*(\mathbf{r},t)\,(-i\hbar\nabla)\,\Psi(\mathbf{r},t)$$

$$<\mathbf{P}_{el}>=\frac{1}{V}\int dV\sum_{\mathbf{G}} a^*_{\mathbf{G}} \; e^{-i(k+G).\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}'} a_{\mathbf{G}'}\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}')e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}').\mathbf{r}}$$

$$=\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{G}}\sum_{\mathbf{G}'} a^*_{\mathbf{G}} \; a_{\mathbf{G}'} \; \hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}')\int dV e^{i(\mathbf{G}'-\mathbf{G}).\mathbf{r}}$$

این انتگرال با استفاده از تعامد امواج تخت، اگر $\mathbf{G}=\mathbf{G}'$ مساوی V است، و در غیر این صورت برابر صفر است، لذا

$$<\mathbf{p}_{el}>=\sum_{\mathbf{G}} |a_{\mathbf{G}}|^2\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G})=\hbar\left(\mathbf{k}+\sum_{\mathbf{G}}\mathbf{G}\,|a_G|^2\right) \qquad (۴-۱۳)$$

که مرحلهٔ آخر از شرط بهنجارش برای تابع موج معادلهٔ (۱۳-۳)، یعنی $\sum_{G} |a_{\mathbf{G}}|^2=1$ ناشی می‌شود.

نتیجهٔ (۱۳-۴) درست همان چیزی است که، ما با توجه به این واقعیت که موج تخت $e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}).\mathbf{r}}$ یک ویژه حالت اندازه حرکت با ویژه مقدار $\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G})$ است و $|a_G|^2$ احتمال یافتن الکترون در این حالت برای تابع موج معادلهٔ (۱۳-۳) است، انتظار داریم. حال اگر الکترون به‌گونه‌ای شتاب بگیرد که بردارموج آن به $\mathbf{k}+\delta\mathbf{k}$ تغییر کند، مقدار چشمداشتی اندازه حرکت آن به مقدار زیر تغییر می‌کند.

$$\delta\mathbf{p}_{el}=\hbar\left(\delta\mathbf{k}+\sum_{\mathbf{G}}\mathbf{G}\;\delta\mathbf{k}.\frac{\partial}{\partial\mathbf{k}}\,|a_G|^2\right) \qquad (۵-۱۳)$$

با یادآوری اینکه وقتی یک الکترون آزاد که از خارج بر بلوری فرود می‌آید پراش براگ یابد، چه اتفاقی می‌افتد یک تعبیر فیزیکی از دومین جملهٔ معادلهٔ (۱۳-۵) حاصل می‌شود. مطابق معادلهٔ (۱۱-۸) تابع موج چنین الکترونی از $e^{i\,\mathbf{k}.\mathbf{r}}$ به $e^{i\,(\mathbf{k}+\mathbf{G})}$ تغییر می‌کند به گونه‌ای که شبکه، اندازه حرکت پس زنی زیر را دریافت می‌کند.

$$\delta\mathbf{p}_{latt}=-\hbar[(\mathbf{k}+\mathbf{G})-\mathbf{k}]=-\hbar\mathbf{G}$$

فرآیند عامتر که در آن ضرایب $a_G(k)$ در معادلهٔ (۱۳-۳) به مقادیری به جز ۱ تغییر می‌کنند را می‌توان به عنوان رشته‌ای از بازتابهای جزیی براگ منظور کرد. در این صورت اندازه حرکت پس‌زنی متناظر برابر خواهد بود با

$$\delta\,\mathbf{p}_{latt}=-\hbar\sum_{G}\mathbf{G}\,\delta\left(|a_G|^2\right) \qquad (۶-۱۳)$$

که درست منفی جملهٔ دوم در معادلهٔ (۱۳-۵) است، به گونه‌ای که تغییر کل در اندازه حرکت بلور عبارت است از

$$\delta \mathbf{p}_{tot} = \delta \mathbf{p}_{\mathbf{el}} + \delta \mathbf{p}_{latt} = \hbar \delta \mathbf{k} \qquad (۱۳-۷)$$

از این نتیجه می‌توان برای توجیه معادلهٔ (۱۳-۲) استفاده کرد؛ چون $\hbar \delta \mathbf{k}$ تغییر در اندازه حرکت کلی دستگاه است، نیروی اعمالی را می‌توانیم مساوی $\hbar\, d\mathbf{k}/\mathbf{dt}$ قرار دهیم.

ابهام در تخصیص اندازه حرکت بین الکترون و شبکه از آن جا ناشی می‌شود که یک الکترون با بردار موج $\mathbf{k}$ را می‌توان در عین حال با بردار موج $\mathbf{k}+\mathbf{G}$ نیز نمایش داد و لذا یک اندازه حرکت خوش تعریف ندارد. همان گونه که قبلاً مشخص کردیم $\hbar\mathbf{k}$ به عنوان اندازه حرکت بلوری الکترون شناخته می‌شود.

درست مانند مورد یک بعدی، می‌توان معادلهٔ (۱۳-۲) را به شکل قانون نیوتن برای ذره‌ای با جرم مؤثر m_e بازنویسی کرد

$$m_e \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e\,\mathbf{E} \qquad (۱۳-۸)$$

بنابراین، مانند بخش ۴-۴، در می‌یابیم که برای یک رابطهٔ پاشندگی همسانگرد، m_e عبارت است از:

$$m_e = \hbar^{2} \left(\frac{\partial^{2} \varepsilon}{\partial k^{2}} \right)^{-1} \qquad (۱۳-۹)$$

همانند حالت یک بعدی، m_e در نزدیکی قلهٔ نوار انرژی منفی است و دینامیک چنین نواحی از فضای $\mathbf{k}$ با تمرکز روی حالتهای خالی به بهترین وجه بررسی می‌شود. این حالتها همان گونه که در بخش ۵-۲ توصیف شد همچون ذرات با بار مثبت و با جرم مؤثر مثبت، رفتار می‌کنند.

برای رابطهٔ پاشندگی ناهمسانگرد، همچون سطوح انرژی در شکل ۱۳-۴، باید معادلات (۱۳-۸) و (۱۳-۹) را اصلاح کرد. به طور عام $\partial\mathbf{v}/\partial t$ و $\partial\mathbf{k}/\partial t$ موازی نیستند؛ به بیان دقیق‌تر:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial}{\partial k_i} \right) = \frac{1}{\hbar} \sum_j \frac{\partial^{2} \varepsilon}{\partial k_i\, \partial k_j} \frac{\partial k_j}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} \sum_j \frac{\partial^{2} \varepsilon}{\partial k_i\, \partial k_j}\, eE_j$$

(شاخص‌های i و $j \equiv x$ و y یا z) (۱۳-۱۰)

که در آخرین مرحله، از معادلهٔ (۱۳-۲) استفاده شده است. مقایسه با معادلهٔ (۱۳-۸) تعریف

یک تانسور جرم مؤثر را مقدور می‌سازد.

$$\left(\frac{1}{m_e}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \, \partial k_j}\right) \qquad (۱۱-۱۳)$$

به گونه‌ای که

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} = -\sum_j \left(\frac{1}{m_e}\right)_{ij} eE_j \qquad (۱۲-۱۳)$$

مفهوم جرم مؤثر تانسوری آن است که الکترون در بعضی از جهت‌ها، لختی بیشتری برای شتابگیری نسبت به دیگر جهتها دارد. اگر یک میدان الکتریکی در راستای بیشترین یا کمترین لختی اعمال شود، شتاب موازی آن میدان است، اما همان گونه که از معادلهٔ (۱۳-۱۲) دیده می‌شود برای میدانی در یک راستای عام، شتاب ترجیحاً در امتداد کمترین لختی است. معادلهٔ (۵-۵۸) برای بسامده تشدید سیکلوترونی الکترونهای نوار رسانش در سیلیسوم را می‌توان با استفاده از مفهوم جرم مؤثر تانسوری نیز به دست آورد (مسئلهٔ ۱۳-۲ (ب)).

* ۱۳-۳-۲ رابطهٔ رسانندگی الکتریکی با سطح فرمی

در بخش ۳-۳ توضیح دادیم که چگونه معادلهٔ حرکت را می‌توان به نحوی اصلاح کرد که برخوردها نیز به حساب آیند و اینکه اثر میدان الکتریکی dc، ایجاد جابه‌جایی کوچک کرهٔ فرمی الکترون آزاد درفضای $\mathbf{k}$ است (معادلهٔ (۳-۳۴)). اصلاح معادلهٔ (۱۳-۲) به آن گونه که زمان واهلش τ مربوط به برخوردها را در بر گیرد به قرار زیر است.

$$\hbar \left(\frac{d\mathbf{k}}{dt} + \frac{\delta \mathbf{k}}{\tau}\right) = -e\mathbf{E} \qquad (۱۳-۱۳)$$

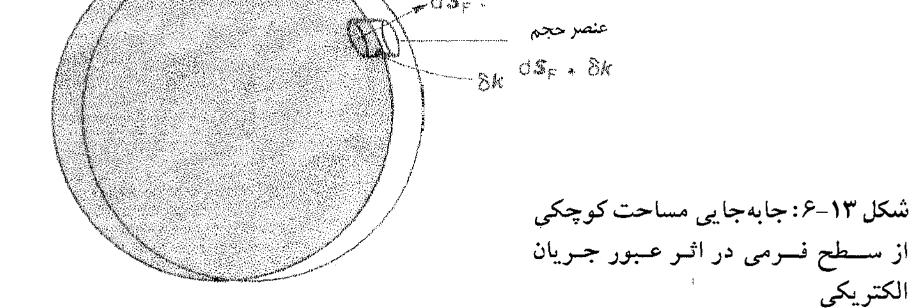
بنابراین، مطابق شکل ۱۳-۶، میدان الکتریکی dc باعث جابه‌جایی ایستای هر نقطهٔ روی سطح فرمی به مقدار زیر می‌شود.

$$\delta \mathbf{k} = \frac{-e\,\mathbf{E}\,\tau}{\hbar} \qquad (۱۴-۱۳)$$

اگر τ ثابت نباشد $\delta \mathbf{k}$ بر روی سطح فرمی تغییر می‌کند. حال رسانایی الکتریکی را مستقیماً با استفاده از این اختلال سطح فرمی و بدون به کارگیری مفهوم جرم مؤثر محاسبه می‌کنیم.

عنصر dS_F از سطح فرمی را در شکل ۱۳-۶ در نظر بگیرید، که به میزان $\delta\mathbf{k}$ جابه جا شده است؛ الکترونهای درون حجم $d\mathbf{S_F}\ .\delta\mathbf{k}$ از فضای $\mathbf{k}$ با سرعت موضعی $\mathbf{v}_F$ حرکت می‌کنند و بنابراین چگالی جریان زیر را حمل می‌کنند.

$$d\mathbf{j} = \frac{2}{(2\pi)^3} (-e)\, \mathbf{v}_F \, (d\mathbf{S}_F \, .\delta\mathbf{k}) \qquad (۱۵-۱۳)$$



شکل ۱۳-۶: جابه‌جایی مساحت کوچکی از سطح فرمی در اثر عبور جریان الکتریکی

که در آن از معادلهٔ (۲-۴۱) برای به دست آوردن مقدار $۲/(۲\pi)^۳$ به عنوان تعداد حالتهای الکترونی به ازای واحد حجم فلز در واحد حجم فضای $\mathbf{k}$ استفاده کرده‌ایم (یادآوری می‌شود که دو حالت اسپینی وجود دارد). چون توزیع الکترونی در حال تعادل در غیاب میدان، جریانی حمل نمی‌کند، از این رو جریان با انتگرال‌گیری dJ بر روی سطح فرمی به دست می‌آید. چون $\mathbf{v}_F$ مساوی $\hbar^{-۱}\ \partial\varepsilon/\partial\mathbf{k}$ است، لذا عمود بر سطح فرمی و بنابراین موازی $d\mathbf{S}_F$ است. لذا بردارهای $\mathbf{v}_F$ و $d\mathbf{S}_F$ در معادلهٔ (۱۳-۱۵) را می‌توان تعویض کرد و با به کار بردن معادله (۱۳-۱۴) داریم:

$$\mathbf{J} = -\frac{۱}{۴\pi^۳}\int e\,d\mathbf{S}_F\ (\mathbf{v}_F\ .\ \delta\mathbf{k}) = \frac{e^۲}{۴\pi^۳\hbar}\int \tau\,d\mathbf{S}_F\,(\mathbf{v}_F\ .\mathbf{E}) \qquad (۱۳\text{-}۱۶)$$

این معادله نشان می‌دهد که رسانندگی در یک بلور ناهمسانگرد، همچون جرم مؤثر، یک کمیت تانسوری است و جریان و میدان تنها در امتدادهای با تقارن بالا با هم موازی‌اند. کمیت $\sigma_{eff} = |\mathbf{j}|/|\mathbf{E}|$ رسانندگی نرده‌ای مؤثر است که به جهت $\mathbf{E}$ بستگی دارد. این کمیت با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\sigma_{eff} = \frac{e^۲}{۴\pi^۳\hbar}\left|\int \tau\,d\mathbf{S}_F\ (\mathbf{v}_F\ .\widehat{\mathbf{E}})\right| \qquad (۱۳\text{-}۱۷)$$

که در آن $\widehat{\mathbf{E}}$ بردار یکه در امتداد $\mathbf{E}$ است. انتگرال معادلهٔ (۱۳-۱۷) را می‌توان به عنوان تعریف مسافت آزاد میانگین l_{el} تلقی کرد که بر روی سطح فرمی به گونه‌ای میانگین‌گیری شده است که

$$\sigma_{eff} = \frac{e^۲ l_{el} S_F}{۴\pi^۳\hbar} \qquad (۱۳\text{-}۱۸)$$

که در آن S_F مساحت آزاد کل سطح فرمی است. این فرمول آگاهی دهنده‌تر از معادلهٔ (۳-۲۷) است؛ وقتی سطح توسط تماس با مرزهای منطقه محدود می‌شود (نظیر شکل ۱۳-۴) این مساحت آزاد کل است که دارای اهمیت است نه تعداد کل الکترونها. مساحت آزاد سطوح فرمی عناصر پنج ظرفیتی ارسنیک، آنتیموان و بیسموت به دلیل پتانسیل دوره‌ای شبکه بسیار کمتر از مقادیر مربوط به الکترونهای آزاد این مواد است. به همین دلیل این مواد دارای رسانندگی الکتریکی کوچک و ظرفیت گرمایی الکترونی پایین هستند؛ آنها را **نیم‌فلز** می‌نامند.

۱۳-۴ تعیین تجربی سطح فرمی

چون نیروی وارد بر یک الکترون واقع در میدان مغناطیسی بر سرعت آن الکترون عمود است، میدان انرژی الکترون را تغییر نمی‌دهد.الکترونی که در آغاز در حالتی روی سطح فرمی است، در اثر اعمال میدان از حالتهای متوالی با انرژی ثابت می‌گذرد و لذا بر روی سطح فرمی باقی می‌ماند؛ بنابراین اندازه‌گیریهایی، که اطلاعاتی در مورد مسیر الکترون (که مدار سیکلوترونی الکترون نام دارد) ارائه می‌کنند، حاوی اطلاعاتی در مورد هندسهٔ سطح فرمی‌اند. در این بخش دو مثال از چنین اندازه‌گیری‌هایی را در نظر می‌گیریم.

(۱) تشدید سیکلوترونی، در این اثر که قبلاً در بخش ۵-۵-۳ برای نیمرساناها بررسی کرده‌ایم، حاملها ناتبهگن‌اند و رابطهٔ پاشندگی سهمی گون دارند.

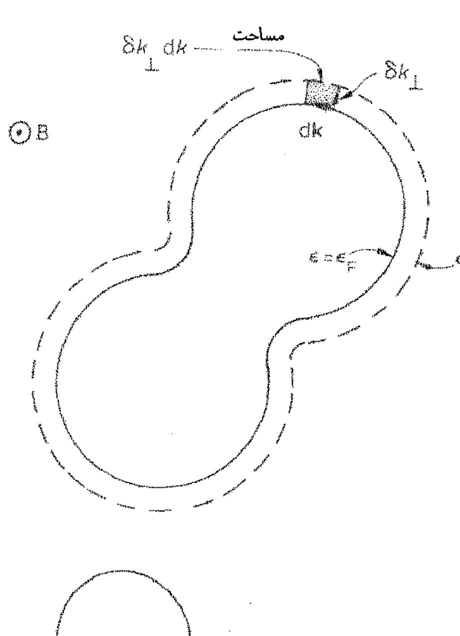
(۲) اثر دو هاس-وان‌الفن، که عبارت از تغییر نوسانی دیامغناطیس الکترون رسانش در اثر اعمال میدان مغناطیسی است که به کوانتش مدارهای سیکلوترونی مربوط می‌شود.

۱۳-۴-۱ مدارهای سیکلوترونی

معادلهٔ حرکت درغیاب برخورد برای یک بسته موج الکترون در فضای $\mathbf{k}$، واقع در میدان مغناطیس عبارت است از

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e\mathbf{V} \times \mathbf{B} = -e\frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B} \qquad (۱۳-۱۹)$$

برای الکترون واقع بر سطح فرمی، $\mathbf{v} = \mathbf{v}_F = \hbar\ (\partial\varepsilon / \partial\mathbf{k})_{\mathbf{F}}$ عمود بر آن سطح است، بنابراین $d\mathbf{k}/dt$ باید بر روی سطح قرار گیرد. چون $d\mathbf{k}/dt$ بر $\mathbf{B}$ نیز عمود است، نتیجه می‌شود که مسیر الکترون در فضای $\mathbf{k}$ مطابق شکل ۱۳-۷ در امتداد پربندهای سطح فرمی در صفحه‌ای عمود بر $\mathbf{B}$ است. از آخرین قسمت معادلهٔ (۱۳-۱۹) می‌بینیم که حرکت در فضای واقعی ارتباط نزدیکی با



(الف) مدار سیکلوترونی در فضای k در صفحهٔ عمود بر B حول سطح فرمی است؛

(ب) تصویر مدار فضای معمولی در صفحهٔ عمود بر میدان، متناظر با مدار فضای k در قسمت (الف) دارای همان شکل و همان سوی چرخش است، ولی به اندازهٔ °۹۰ حول امتداد میدان چرخیده است.

شکل ۱۳-۷

حرکت در فضای **k** دارد؛ دقیق‌تر بگوییم، تصویر حرکت در فضای واقعی بر صفحه‌ای عمود بر **B** مطابق شکل ۱۳-۷ الف، دارای همان شکل و جهت چرخش مدار حرکت در فضای **k** است با این تفاوت که تنها به اندازهٔ °۹۰ چرخیده است. اندازهٔ مدار در فضای واقعی با ضریبی برابر $\hbar/eB$ با اندازهٔ بردار در فضای **k** اختلاف دارد.

با به کار بردن معادلهٔ (۱۳-۱۹)، دورهٔ T ی مدار به قرار زیر است

$$T = \oint dt = \oint \frac{dt}{dk}\, dk = \oint \frac{\hbar dk}{e\,|\,\mathbf{v} \times \mathbf{B}\,|} = \oint \frac{\hbar\, dk}{e\nu_\perp B} \qquad (۱۳-۲۰)$$

که در آن $\nu_\perp$ مؤلفهٔ سرعت گروه الکترون در صفحهٔ عمود بر **B** است؛ این معادله را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\nu_\perp = \hbar^{-1} \frac{\delta \varepsilon}{\delta k_\perp} \qquad (۱۳-۲۱)$$

که در آن همان گونه که در شکل ۱۳-۷ (الف) نشان داده شده است $\delta k_\perp$ فاصلهٔ عمودی بین پربندهای انرژی ε_F و $\varepsilon_F + \delta\varepsilon$ در این ناحیه صفحه است. بنابراین، با درج معادلهٔ (۱۳-۲۱) در معادلهٔ (۱۳-۲۰) داریم

$$T = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{\oint \delta k_\perp \, dk}{\delta \varepsilon}$$

$\delta k_\perp \, dk$ مساحت هاشورزده در شکل ۱۳-۷ (الف) است، به گونه‌ای که $\oint \delta k_\perp \, dk$ مساحت کل δA_k در فضای **k** بین دو پربند در صفحهٔ عمود بر **B** است. در حد $\delta\varepsilon \to 0$، عبارت $\delta A_k / \delta\varepsilon$ را می‌توان به صورت $dA_k / d\varepsilon$ نوشت و A_k را می‌توان به عنوان مساحت مدار سیکلوترونی در فضای **k** تعبیر کرد. بنابراین بسامد سیکلوترونی را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\omega_c = \frac{2\pi}{T} = \frac{2\pi e B}{\hbar^2} \frac{d\varepsilon}{dA_k} \qquad \text{(۱۳-۲۲)}$$

مقایسهٔ این بسامد با مقدار $\omega_c = eB/m$ مربوط به الکترونهای آزاد، امکان تعریف جرم مؤثر زیر را فراهم می‌کند

$$m_c = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{dA_k}{d\varepsilon} \qquad \text{(۱۳-۲۳)}$$

جرم مؤثر سیکلوترونی با جرم مؤثر m_e ی معرفی شده در بخش ۱۳-۳-۱ فرق دارد؛ m_c ویژگی یک مدار است و متناسب با میانگین مشتق اول $(d\varepsilon/dk)^{-1}$ روی مدار است؛ m_e به مشتق دوم، $\partial^2\varepsilon/\partial k^2$، در یک نقطه از فضای **k** بستگی دارد. دو جرم فقط برای رابطهٔ پاشندگی همسانگرد سهمی‌وار $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_e$ یکی هستند (مسئله ۱۳-۲ (الف))

در به دست آوردن معادلات (۱۳-۲۲) و (۱۳-۲۳) هیچ توجهی به علامتها نکردیم، اما اینک نشان می‌دهیم که این معادلات، آن گونه که نوشته شده‌اند، علاوه بر بسامد سوی چرخش مدار را نیز مشخص می‌کنند. همچون گذشته قرارداد معرفی شده در بخش ۵-۵-۳ را می‌پذیریم، که چرخش در جهت ساعتگرد حول میدان به یک ω_c ی مثبت مربوط است؛ مطابق این قراردارد علامت، الکترونهای *آزاد* دارای ω_c ی مثبت هستند (شکل ۵-۱۰ را ببینید). از معادلهٔ (۱۳-۱۹) نتیجه می‌گیریم که اگر سرعت **v** مربوط به سطح فرمی در شکل ۱۳-۷ (الف) برونسو باشد در آن صورت ω_c مثبت خواهد بود. این وضعیت در صورتی پیش می‌آید که انرژی حالتهای خارج سطح فرمی بیش از انرژی حالتهای درون آن باشند؛ در آن صورت $d\varepsilon/dA_k$ مثبت خواهد بود و معادلات (۱۳-۲۲) و (۱۳-۲۳) علامت ω_c را به درستی پیش‌بینی می‌کنند.

طبق قواعد ارائه شده در بخش ۱۳-۲-۱، آن بخش از سطح فرمی که ω_c ی مثبت دارد الکترون گونه دسته‌بندی می‌شود. متقابلاً، اگر **v** درونسو باشد، ω_c منفی خواهد بود: در این صورت

$d\varepsilon / dA_k$نیز منفی است و باز معادلات (۱۳-۲۲) و (۱۳-۲۳) علامت ω_cرا درست پیش بینی می‌کنند. چنین سطحی به عنوان حفره گونه دسته‌بندی می‌شود.

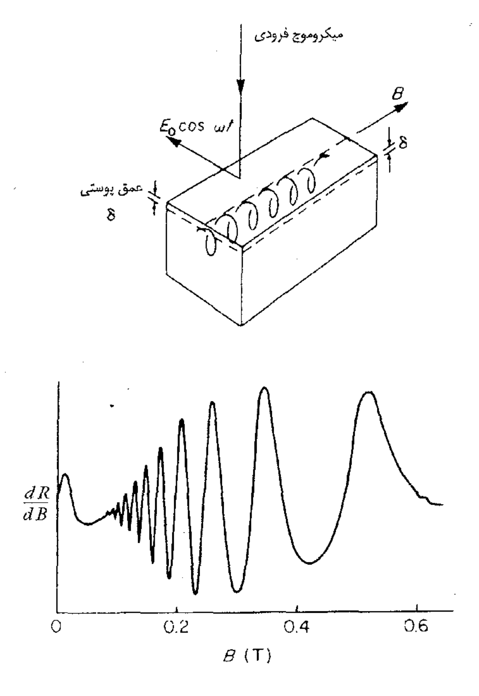
فرض می‌کنیم که در اندازه‌گیریهای تشدید سیکلوترونی، نظیر بسیاری از دیگر خواص الکترونی فلزها، سهم عمده را الکترونهای نزدیک سطح فرمی بر عهده داشته باشند؛ در حقیقت اصل پاؤلی مانع از آن می‌شود که الکترونهای حالتهای پایین‌تر در یک آزمایش تشدید سیکلوترونی انرژی جذب کنند. با این وجود، ممکن است بسامد پیش‌بینی شده توسط معادلهٔ (۱۳-۲۳) برای سطح مقطعهای متفاوت عمود بر میدان روی سطح فرمی یکسان نباشند، می‌توان نشان داد که بسامد برای تمام مقطعهای یک بخش کروی یا بیضیوار از سطح فرمی یکسان است. با وجود این، در حالت عام، سطح مقطعهایی که بسامد مربوط به آنها به صورت تابعی از مکان در امتداد محور k_z از بیشینه یا کمینه‌ای عبور می‌کنند نقش عمده را در رفتار دارند؛ در حقیقت این بسامدهای بیشینه و کمینه هستند که در عمل مشاهده می‌شوند. این امر مثالی است از نتیجهٔ عام ترکیب طیف پیوسته‌ای از بسامدها، که ***اصل فاز مانا*** نامیده می‌شود.

فرض کرده‌ایم که مقطعهای سطح فرمی عمود بر میدان مانند شکل ۱۳-۷ (الف) مدار بسته‌ای را به وجود می‌آورند. وضعیت همواره چنین نیست؛ برای سطوح فرمی با همبندی پیچیده در طرح منطقه‌ای تکراری، نظیر شکل ۱۳-۴ (ب) ممکن است مدارهای باز حاصل شود که الکترون در آنها هرگز به حالت **k** اولیه خود بر نمی‌گردد. تشدید سیکلوترونی را نمی‌توان برای چنین مدارهایی مشاهد کرد، ولی وجود آنها نقش مهمی دربعضی از خواص دارد، مثلاً در مغناطو مقاومت، که وابستگی مقاومت الکتریکی به میدان مغناطیسی اعمالی است.

۱۳-۴-۲ تشدید سیکلوترونی در فلزات

بررسی ما در بارهٔ تشدید سیکلوترونی در نیمرساناها (بخش ۵-۵-۳) به طور ضمنی مبتنی بر این فرض بود که میدان الکتریکی میکروموج در سرتاسر مدار الکترون یکنواخت باشد. این فرض برای نیمرساناها منطقی است زیرا چگالی اندک حاملهای بار در بسامدهای میکرو موج منجر به رسانندگی کم و در نتیجه عمق پوستی الکترومغناطیسی زیاد می‌شود[1]. چگالی حاملها در فلزات بسیار بزرگتر است و عمق پوستی معمولاً کوچکتر از شعاع مدار سیکلوترونی در فضای حقیقی است. این امر به کارگیری ترتیب آزمایشی متفاوتی را، برای مشاهدهٔ تشدید سیکلوترونی در فلزات تحت نام هندسهٔ ازبل - کینر مطابق شکل ۱-۸ (الف)

۱- برای توصیف عمق‌پوستی الکترومغناطیسی به بخش ۱۳-۶ مراجعه کنید.



(الف) هندسهٔ ازبل - کینر برای مشاهدهٔ تشدید سیکلوترونی در فلزات. B موازی سطح نمونه است و اگر بسامد ω هماهنگی از بسامد مدار، ω_c، باشد الکترون هر بار که به عمق‌پوستی وارد می‌شود توسط میدان میکرو موج شتاب می‌گیرد.

(ب) مشتق مقاومت سطحی مس در ۲۴ GHz، نسبت به میدان. (با کسب مجوز از مأخذ زیر اقتباس شده است.

A. F. Kip, D. N. Langenberg and T. W. Moore, Phys. Rev. **124**, *359 (1962)*

۱۳-۸

ایجاب می‌کند؛ این هندسه شباهت به هندسهٔ سیکلوترو نهایی دارد که برای شتاب دادن ذرات بنیادی به کار می‌رود.

میدان مغناطیسی ایستای B به موازات سطح تخت نمونه اعمال می‌شود، به گونه‌ای که بعضی از الکترونها در طی مدارهای سیکلوترونی خود براساس معادلهٔ (۱۳-۱۹) به عمق پوستی وارد می‌شوند، در آنجا میدان الکتریکی میکروموج $E_\circ \cos(\omega t)$ یکبار در هر دور بر آنها اثر می‌کند. چون عمق پوستی بسیار کوچکتر از شعاع مدار است، الکترون، میدان میکروموج را برای مدتی کوتاه در مقایسه با دورهٔ مدار "مشاهد می‌کند". اگر هر بار که الکترونها به عمق پوستی وارد می‌شوند، میدان الکتریکی در یک راستا باشد الکترونها از میکرو موجها انرژی دریافت می‌کنند؛ این در صورتی حاصل می‌شود که بسامد میکروموج با یکی از بسامدهای هماهنگ بسامد سیکلوترونی برابر باشد

$$\omega = l\omega_c = l\frac{2\pi eB}{\hbar^2} \frac{d\varepsilon}{dA_k} \qquad (۱۳\text{-}۲۴)$$

که در آن l یک عدد صحیح مثبت است. متداول است که بسامد میکروموج ثابت باشد و میدان مغناطیسی B تغییر کند، لذا انتظار داریم که توان جذبی برحسب $1/B$ دوره‌ای باشد و دوره به

قرار زیر باشد

$$\delta\left(\frac{1}{B}\right)=\frac{2\pi e}{\hbar^2\omega}\ \frac{d\varepsilon}{dA_k} \tag{۱۳-۲۵}$$

بعضی از اندازه‌گیریهای مقاومت سطحی مس در حضور میکروموج (در اصل مقیاسی از انرژی جذب شده در عمق پوستی)، که این دوره‌ای بودن را نشان می‌دهند، در شکل ۱۳-۸ (ب) نمایش داده شده‌اند. در اینجا نیز همچون نیمرساناها، برای مشاهدهٔ تشدید سیکلوترونی لازم است که مسافت آزاد میانگین الکترونی از شعاع مدار در فضای حقیقی به مراتب بزرگتر باشد؛ الکترون قبل از پراکنده شدن باید بیش از یک دور کامل را طی کند.

۱۳-۴-۳ کوانتش مدارهای سیکلوترونی

بـه دست آوردن معادلهٔ حرکت الکترونها به شکل معادلات (۴-۲۴)، (۱۳-۲) و (۱۳-۱۹) با این فرض صورت می‌گیرد که مسیر یک بسته موج الکترون همچون یک ذره کلاسیکی است. چون امواج تشکیل‌دهندهٔ بسته موج در اصل منشاء مکانیک کوانتومی دارند، این رهیافت غالباً **شبه کلاسیکی** نامیده می‌شود. وقتی B به اندازه‌ای بزرگ باشد، که $\hbar\omega_c \sim \varepsilon_F$، معادلات شبه کلاسیکی قطعاً با شکست روبه‌رو می‌شوند، زیرا در این حالت شعاع مدار سیکلوترونی در فضای حقیقی از اندازهٔ بسته موج کوچکتر می‌شود (مسئلهٔ ۱۳-۴). حتی در میدانهای کوچکتر نیز می‌توانیم انتظار داشته باشیم که حرکت دوره‌ای شبه کلاسیکی در بسامد ω_c ، به کوانتش انرژی الکترون، با گامهای $\hbar\omega_c$ منجر شود. برای بررسی ماهیت این کوانتش لازم است در بارهٔ اثر میدان مغناطیسی بر ترازهای انرژی الکترون مفصل‌تر بحث کنیم.

مطلب را با الکترونهای **آزاد** شروع می‌کنیم. تابع موج در غیاب میدان، یک موج تخت است (معادلهٔ (۳-۳))

$$\psi(x,y,z)=\frac{1}{\sqrt{V}}\ e^{ik_x x}\ e^{ik_y y}\ e^{ik_z z}$$

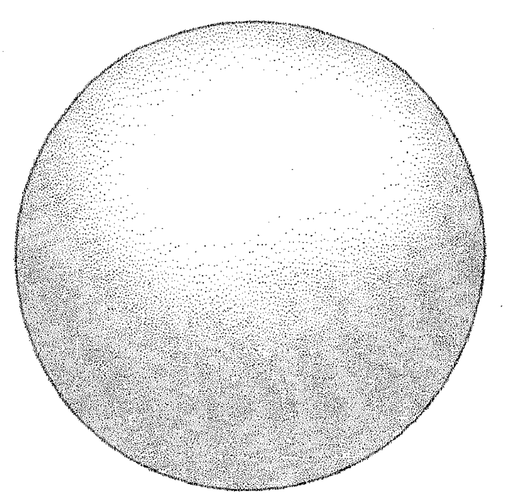
با انرژی (معادلهٔ (۳-۵))

$$\varepsilon=\frac{\hbar^2}{2m}\ (kx^2+ky^2+kz^2)$$

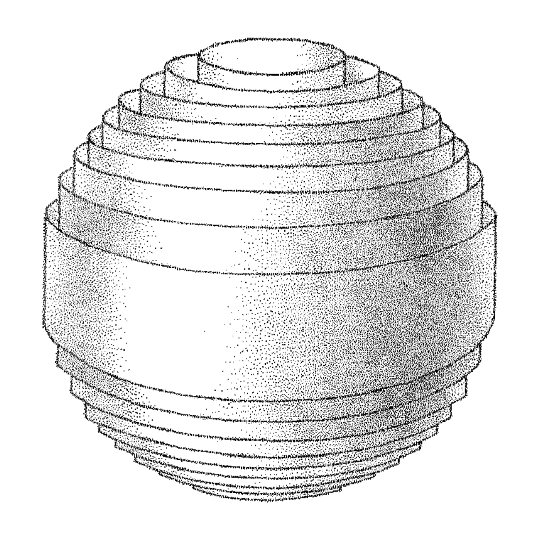
در حضور میدان معادلهٔ شرودینگر را می‌توان دقیقاً حل کرد (مسئلهٔ ۱۳-۵). ترازهای انرژی برای میدان اعمال شدهٔ موازی محور z به شکل زیراند[1]

$$\varepsilon=(n+\frac{1}{2})\,\hbar\omega_c+\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \tag{۱۳-۲۶}$$

۱- در حال حاضر از اثر اسپین الکترون چشم‌پوشی می‌کنیم (بخش ۱۳-۴-۴ را ببینید)



(الف) در غیاب میدان مغناطیسی، الکترون‌های آزاد در $T=0$ به طور یکنواخت در سرتاسر کرهٔ فرمی توزیع شده‌اند.



(ب) میدان مغناطیسی به گونه‌ای باعث کوانتش مدارهای سیکلوترونی می‌شود که الکترونها روی رشته‌ای از استوانه‌های هم محور در فضای $\mathbf{k}$ قرار می‌گیرند. قسمتهای اشغال شدهٔ استوانه‌ها در اصل قسمتهایی از استوانه‌ها هستند که داخل سطح فرمی اصلی قرار دارد و استوانه‌ها، با افزایش میدان منبسط و به سوی بیرون سطح فرمی حرکت می‌کنند. ناحیهٔ اشغال شدهٔ یک استوانه درست به هنگام عبور از سطح فرمی سریع‌تر از هر موقعیت دیگر کاهش می‌یابد.

شکل ۱۳-۹

که در آن $\omega_c = \dfrac{eB}{m}$ بسامد سیکلوترونی الکترونهای آزاد است. حرکت در راستای میدان همانند مسئلهٔ کلاسیکی متناظر، تحت تأثیر میدان قرار نمی‌گیرد؛ وابستگی تابع موج به z همان صورت معادلهٔ (۳-۳) را دارد و وابستگی انرژی به k_z به همان شکل معادلات (۳-۵) و (۱۳-۲۶) است. اعمال شرایط مرزی دوره‌ای در امتداد z، مقادیر مجاز k_z، را مانند گذشته (معادلهٔ (۳-۴)) برابر

$2\pi r/L$ به دست می‌دهد. مدارهای سیکلوترونی در صفحهٔ عمود بر میدان، از طریق تغییر قابل توجهی در وابستگی توابع موج به xو yتجلی می‌کنند، توابع موج در این صفحه، به جای امواج تخت که در سرتاسر صفحهٔ xyگسترده‌اند در طولی از مرتبهٔ شعاع سیکلوترونی جایگزیده‌اند اولین جمله در ویژه مقدار انرژی در معادلهٔ (۱۳-۲۶) کوانتش مربوط به حرکت دوره‌ای در بسامد ω_c را منعکس می‌کند. ترازهای انرژی حاصل از این معادله ***ترازهای لاندائو*** نامیده می‌شوند.

هر تراز لاندائو را می توان معادل مجموعه‌ای از مدارهای سیکلوترونی شبه کلاسیکی در فضای **k** دانست، که دارای همان انرژی هستند (این کار سودمند هم هست). مدارهای شبه کلاسیکی پربندهای انرژی ثابت (در میدان صفر) در صفحهٔ عمود بر میدان (یعنی k_z ثابت) هستند. از مقایسهٔ معادلات (۳-۵) و (۱۳-۲۶)، مدارهای متناظر با تراز nام لاندائو به صورت زیر تعیین می‌شوند

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2+k_y^2\right)=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c \qquad \textbf{(۱۳-۲۷)}$$

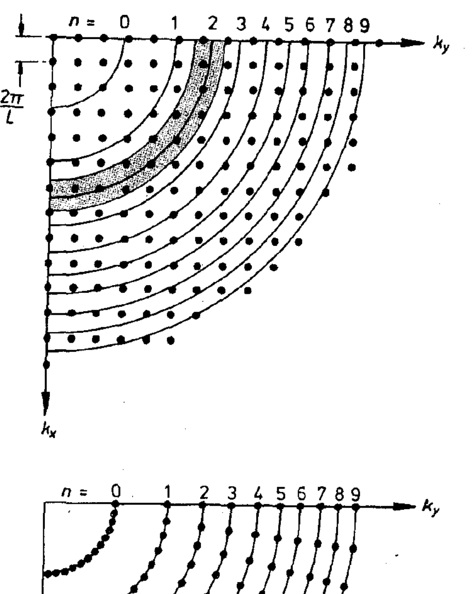
این معادله دسته‌ای از استوانه‌های هم محور و موازی با میدان را، همان گونه که در شکل ۱۳-۹ نشان داده شد تعریف می‌کند. استوانهٔ nام متناظر است با تراز nام لاندائو و با استفاده از معادلهٔ (۱۳-۲۷) مساحت زیر را دارد

$$A_n=\pi\left(k_x^2+k_y^2\right)=\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{2\pi eB}{\hbar} \qquad \textbf{(۱۳-۲۸)}$$

که در آن کمیت $\omega_c=eB/m$ را به کار برده‌ایم. از نقطه نظر مکانیک کوانتومی، تشدید سیکلوترونی، آن گونه که با معادلهٔ (۱۳-۲۴) توصیف شد، به عنوان برانگیختگی الکترونها از استوانهٔ ترازn ام لاندائو به استوانهٔ تراز $(n+1)$ ام لاندائو توسط جذب یک فوتون با انرژی $\hbar\omega=l\hbar\omega_c$ تلقی می‌شود.

تبهگنی مدارها[1] روی هر استوانه برای هر مقدار معین k_zرا می‌توان، مانند تبهگنی در غیاب میدان، با اعمال شرایط مرزی مناسب در صفحهٔ xyبه دست آورد. دیده می‌شود که چگالی **میانگین** حالتها در فضای **k** با مقدار این چگالی در غیاب میدان یکسان است. این نکته در شکل ۱۳-۱۰، که مقطعی در فضای **k** و عمود بر محورz است، نمایش داده شده است. شکل ۱۳-۱۰ (الف) شبکهٔ مربعی ساده از حالتهای الکترونی در این صفحه را در غیاب میدان، همراه با ساختار استوانه‌ای لاندائو، نشان می‌دهد. شکل ۱۳-۱۰ (ب) حالتهای در حضور میدان را نشان می‌دهد که بر روی استوانه‌های تراز لاندائو قرار

۱- مدارها می‌توانند بدون اینکه اصل پاؤلی را نقض کنند، تبهگن باشند، زیرا مراکز آنها در فضای حقیقی در نقاط مختلف صفحهٔ xy قرار دارند.



(الف) نقطه‌ها مقادیر مجاز **k** را با مقدار ثابت k_z در **غیاب** میدان نشان می‌دهند. دایره‌های رسم شده ترازهای لاندائو حاصل از اعمال میدان برای الکترونهای آزاد هستند، به هر تراز لاندائو می‌توان **مساحت مساوی** از این مقطع فضای **k** را مربوط کرد؛ ناحیهٔ شورزده مساحت مربوط به تراز n=۲ را نشان می‌دهد.

(ب) در حضور میدان، حالتهای مجاز بر روی استوانه‌های تراز لاندائو هستند. تعداد حالتهای مربوط به هر تراز برای هر مقدار k_z برابر تعداد متعلق به مساحت مربوط در شکل (الف) است.

شکل ۱۳-۱۰ : اثر میدان مغناطیسی بر حالتهای مجاز الکترون آزاد

دارند؛ هر حالت در شکل ۱۳-۱۰ (الف) به گونه‌ای به نزدیکترین استوانهٔ لاندائو منتقل شده است که چگالی میانگین حالتها در فضای **k** تغییر نکند. مطابق معادلهٔ (۱۳-۲۸)، مساحت بین استوانه‌های متوالی در فضای **k** مساوی $2\pi eB\hbar$ و مستقل از n است. چگالی حالتها به ازای واحد سطح در شکل ۱۳-۱۰ (الف) برابر $(L/2\pi)^2$ است به نحوی که تعداد حالتهای g_n مربوط به تراز لاندائو برای هر مقدار k_z و هر امتداد اسپین برابر است با

$$g_n = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \left(\frac{2\pi eB}{\hbar}\right) = \frac{eBL^2}{h} \qquad \text{(۱۳-۲۹)}$$

که این نیز مستقل از n است. از معادلهٔ (۱۰-۳۰) می‌دانیم که، $h/2e$ کوانتوم شار مربوط به یک

زوج کوپر از الکترونها در یک ابررساناست؛ بنابراین h/e را می‌توان به عنوان کوانتوم شار برای الکترونهای منفرد تلقی کرد. BL^2 شار مغناطیسی است که از بلور عبور می‌کند به گونه‌ای که gn درست برابر تعداد کوانتومهای شاری است که از بلور عبور می‌کند.

۱۳-۴-۴ اثر دو هاس - وان آلفن

اگر مقادیر نوعی $10T$ برای B و $1\text{Å}^{-2} = 10^{20}\,m^{-2}$ را برای مساحت سطح مقطع سطح فرمی در فضای $\mathbf{k}$، در نظر بگیریم، طبق معادلهٔ (۱۳-۲۸)، تعداد ترازهای لاندائوای که از کرهٔ الکترون آزاد شکل ۱۳-۹ عبور می‌کند برابر خواهد بود با

$$n \approx \frac{\hbar A_n}{2\pi e B} \approx \frac{10^{-34} \times 10^{20}}{2\pi \times 10^{-19} \times 10} \approx 10^{3}$$

بنابراین فاصلهٔ بین ترازها در مقایسه با شعاع کره، کوچک است. چون چگالی حالتها در فضای $\mathbf{k}$ به طور متوسط با مقدار آن در غیاب میدان یکسان است، حالتهایی که در $T = 0$ اشغال شده‌اند تقریباً همانهایی هستند که در قسمتهایی از لوله‌های استوانه‌ای قرار دارند که مطابق شکل ۱۳-۹ درون کرهٔ فرمی اصلی واقع شده‌اند.

با افزایش میدان مغناطیسی شعاع هر استوانهٔ تراز لاندائو افزایش می‌یابد و سرانجام بزرگتر از شعاع کرهٔ فرمی می‌شود؛ وقتی این وضعیت پیش می‌آید، تعداد الکترونهای موجود در آن کاهش می‌یابد و به سمت صفر می‌رود، زیرا، مطابق معادلهٔ (۱۳-۲۹)، حالتهای بیشتری روی ترازهای پایین‌تر در دسترس قرار می‌گیرند. از شکل ۱۳-۹، واضح است که آهنگ از دست دادن الکترونها زمانی که استوانه در آستانهٔ عبور از سطح است بیشترین است. تحت چنین شرایطی شاید عجیب نباشد که با تغییر میدان مغناطیسی یک سهم کوچک نوسانی در انرژی الکترونها موجود باشد. دورهٔ این نوسان، از مساوی قرار دادن مساحت، A_n، استوانه‌های پیاپی لاندائو با مساحت سطح فرمی $A_F = \pi k_F^2$ به دست می‌آید؛ بنابراین، با توجه به معادلهٔ (۱۳-۲۸)، نوسانها برحسب $1/B$ دوره‌ای بوده و دوره برابر است با

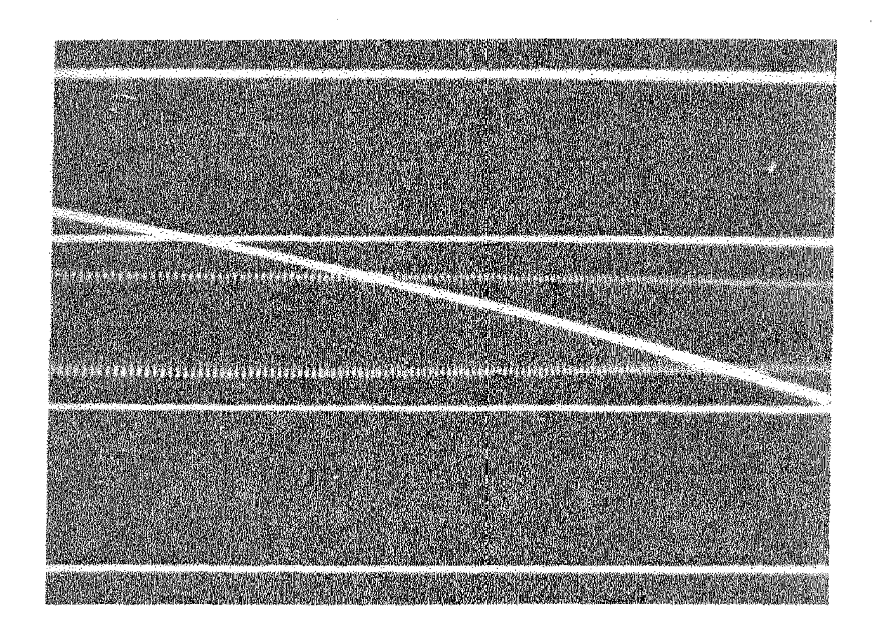
$$\delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi e}{\hbar A_F} \qquad (۱۳\text{-}۳۰)$$

وابستگی نوسانی انرژی به میدان مغناطیسی حاکی از آن است که مغناطش نیز نوسانی است[1]. تغییر حاصل در گشتاور مغناطیس نمونه را می‌توان آشکار کرد، این پدیده به ***اثر دوهاس - وان الفن*** معروف است.

۱- مغناطش $\mathbf{M}$ عبارت است از $(\partial F/\partial B)_T$ که در آن $F = U - TS$ انرژی آزاد هلمهولتز است

شکل ۱۳-۱۱ نوسانهای دو هاس - وان الفن را برای مس نمایش می‌دهد. برای تعبیر این نوسانها لازم است نتیجهٔ (۱۳-۲۸) را در مورد الکترونهای موجود در پتانسیل دوره‌ای شبکه تعمیم دهیم. انجام دقیق این کار مشکل است. ساده‌ترین راه برای کوانتش مدارهای سیکلوترونی شبه کلاسیکی آن است که از اصل همخوانی استفاده شود که به موجب آن نتایج مکانیک کوانتومی در حدی مناسب به طور هموار به نتایج کلاسیکی منجر می‌شوند. بنابراین تفاوت انرژی مدارهای پیاپی کوانتومی در حد اعداد کوانتومی بزرگ باید با حاصلضرب $\hbar$ در بسامد مدار شبه کلاسیکی معادلهٔ (۱۳-۲۲) برابر شود؛ به عبارت دیگر

$$\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1} = \hbar\omega_c = \frac{2\pi eB}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dA_k} \qquad (۱۳-۳۱)$$



شکل ۱۳-۱۱: نوسانهای دوهاس - وان‌الفن در مس. خط مایل تغییر میدان مغناطیس را نشان می‌دهد و خطوط افقی میدانهای ۱۰/۴۷، ۱۰/۷۰، ۱۰/۹۳ و ۱۱/۱۶ تسلا را مشخص می‌کنند. این میدان مغناطیسی با تخلیهٔ یک خازن بزرگ در سیملوله‌ای که با نیتروژن مایع سرد می‌شده به دست آمده است. میدان مغناطیسی از مقدار بیشینهٔ اندکی بیشتر از ۱۱ تسلا با ثابت زمانی چند میلی ثانیه افت کرده است؛ پهنای مسیر روی اسیلوسکوپ حدود $1ms$ است. نوسانها به صورت ولتاژ موجود در پیچهٔ برگیر حاوی نمونه ظاهر می‌شود. (با کسب مجوز از مأخذ زیر اقتباس شده است

D. Shoenberg, Phil. Trans. R. Soc. **A 255**, *85 (1962)*)

در حد اعداد کوانتومی بزرگ می‌توانیم مشتق را به صورت زیر تقریب بزنیم

$$\frac{d\varepsilon}{dA_k} = \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}}{A_n - A_{n-1}}$$

که در این صورت معادله (۱۳-۳۱) چنین خواهد شد.

$$A_n - A_{n-1} = \frac{2\pi eB}{\hbar}$$

این معادله در صورتی برقرار است که داشته باشیم

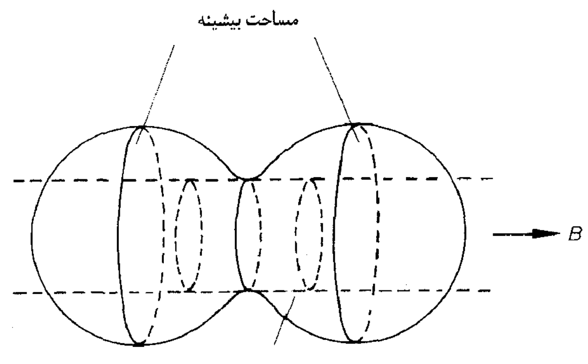
$$A_n = (n+\gamma)\frac{2\pi eB}{\hbar} \qquad \text{(۱۳-۳۲)}$$

که در آن γ مستقل از n است.

شباهت این معادله با نتیجهٔ مربوط به الکترون آزاد، معادلهٔ (۱۳-۲۸)، حاکی از آن است که رفتار کیفی الکترون با وارد کردن پتانسیل دوره‌ای شبکه تغییر اندکی دارد. مدارهای سیکلوترونی کوانتیده، روی رشته‌ای از لوله‌های در راستای میدان قرار دارند؛ مساحت سطح مقطع هر لوله توسط معادلهٔ (۱۳-۳۲) داده می‌شود[1]. و مقطع خود یک پربند انرژی ثابت است، ولی به طور عام دایره‌ای نیست و شکل آن می‌تواند در امتداد راستای میدان تغییر کند. همان گونه که در شکل ۱۳-۱۲ مشخص شده است، دورهٔ نوسانهای دوهاس- وان الفن با مساوی قراردادن مساحت مدارهای متوالی کوانتیده با مساحت سطح مقطعهای فرین عمود بر میدان روی سطح فرمی تعیین می‌شود.اندازه‌گیری دورهٔ $\delta(1/B)$ نوسانها، این امکان را فراهم می‌کند که با به کارگیری معادلهٔ (۱۳-۳۰) مساحتهای فرین محاسبه شوند. باید توجه کرد که لوله‌های مدار کوانتیده، برای نواحی حفره‌گونهٔ سطح فرمی با افزایش میدان منقبض می‌شوند و نه منبسط.

اثر دوهاس- وان الفن اولین بار در نیم فلز بیسموت کشف شد، که دارای بسته‌های کوچک سطح فرمی حاوی تنها حدود 10^{-5} الکترون به ازای هر اتم است و در نتیجه، با استفاده از معادلهٔ (۱۳-۳۰)، دورهٔ بزرگ و به آسانی مشاهده‌پذیری دارد. دوره‌های خیلی کوچکتر مربوط به سطوح فرمی حاوی حدود یک الکترون به ازای هر اتم به آن معناست که برای مشاهدهٔ رضایتبخش پدیده، میدان‌هایی از مرتبهٔ ۱۰ تسلا در $1\,K$ مورد نیاز است؛ معمولاً سیم پیچهای ابررسانا برای تولید میدانهای بزرگ مورد نیاز استفاده می‌شود. میدان ac ی کوچک $B_1 \cos(\omega t)$ در بسامد مناسب ω با استفاده از یک پیچهٔ کمکی افزوده می‌شود. نمونه‌ها به طور نوعی به صورت سیمهای تک بلور به طول چند میلی‌متر هستند که درون یک پیچهٔ برگیر

۱- فرض می‌شود که γ در معادلهٔ (۱۳-۳۲) مستقل از k_z است.



شکل ۱۳-۱۲ : نوسانهای دو هاس- وان‌الفن که با عبور لوله‌های مدار سیکلوترونی کوانتیده از سطح مقطعهای فرین سطح فرمی عمود بر میدان مربوط می‌شوند. شکل بخشی از سطح فرمی با سطح مقطع‌های بیشینه و کمینه را نمایش می‌دهد.

سوار شده‌اند، این پیچه غالباً به طور سری همراه با پیچهٔ (پوچ) برگیر مشابه دیگری است که در جهت عکس پیچهٔ حاوی نمونه پیچیده شده است تا آثاری که به نمونه مربوط نمی‌شود حذف شود. مغناطش نمونه در میدان اعمالی مدوله شده را می‌توان به صورت یک سری تیلور حول میدان میانگین B_0 بسط داد.

$$M(t) = M(B_0) + [B_1 \cos(\omega t)] \left(\frac{dM}{dB}\right)_{B_0} + \frac{1}{2} [B_1 \cos(\omega t)]^2 \left(\frac{d^2 M}{dB^2}\right)_{B_0} + \dots$$

نیروی محرکه الکتریکی در پیچهٔ برگیر متناسب است با

$$-\frac{dM}{dt} = \pm \omega B_1 \left(\frac{dM}{dB}\right)_{B=B_0} \sin(\omega t) + \frac{1}{2} \omega B_1^2 \left(\frac{d^2 M}{dB^2}\right)_{B=B_0} \sin(2\omega t) + \dots$$

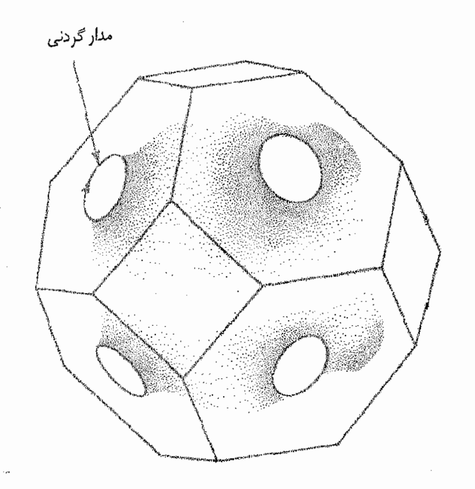
(۱۳-۳۳)

نوسانهای مغناطش وابسته به اثر دوهاس – وان الفن منجر به مقدار غیر صفری برای (d^2M/dB^2) می‌شوند، که به صورت تابعی از B_0 نوسان می‌کند. بنابراین بهترین راه برای مشاهدهٔ این اثر آن است که از آشکارسازی حساس فاز در بسامد 2ω استفاده شود؛ به این طریق نسبت سیگنال به نوفه بهبود می‌یابد و آثار دریافت شدهٔ خطی در بسامد ω حذف می‌شوند. بهترین انتخاب برای دامنهٔ مدوله B_1 آن است که با دورهٔ دو هاس –وان الفن قابل مقایسه باشد.

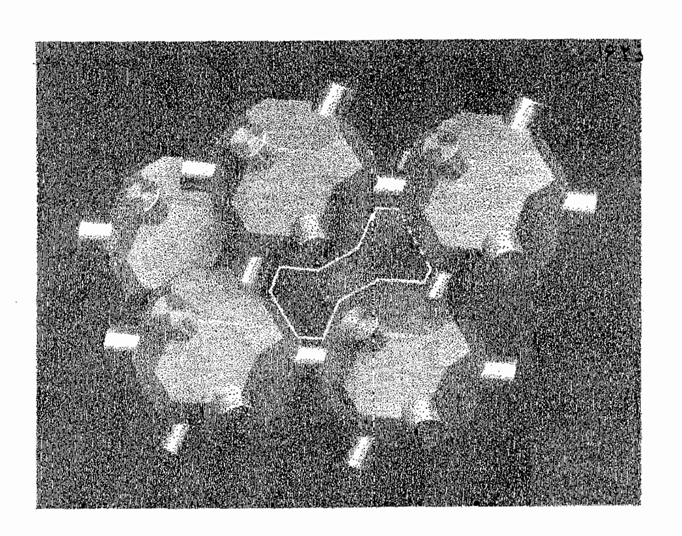
ارزش ویژهٔ اثر دوهاس - وان الفن در آن است که، در مورد یک سطح فرمی پیچیدهٔ حاوی قطعات گوناگون، سیگنال دوره‌ای جداگانه‌ای برای هر مساحت فرین به دست می‌دهد. بسامد سیگنال نشان داده شده در شکل ۱۳-۱۱ تقریباً مساوی مقدار مربوط به کرهٔ الکترون آزاد حاوی یک الکترون به ازای هر اتم است (مسئلهٔ ۱۳-۶)، اما برای مس (و نیز برای نقره و طلا، که آنها نیز فلزات با ساختار مکعبی تنک پکیده هستند) بسامدهای کاملاً متفاوت دیگری نیز مشاهده می‌شوند. در نهایت به این نتیجه می‌رسیم که سطح فرمی در این فلزات به سمت همهٔ وجوه منطقهٔ اول بریلوئن کشیده می‌شود و عملاً، مطابق شکل ۱۳-۱۳ (الف)، بر وجوه شش گوشی {۱۱۱} مماس می‌شود. بنابراین علاوه بر مدار اصلی "شکمی" یک مدار "گردنی" با مساحت کمینه نیز در محل تماس با مرز منطقهٔ بریلوئن وجود دارد. شکل ۱۳-۱۳ (ب) یک مدل طرحواره از سطح فرمی مس را در طرح منطقه‌ای تکراری نشان می‌دهد؛ یک مدار حفره به نام "استخوان سگی" نشان داده شده است. تماس با مرز منطقه موجب می‌شود که سطح فرمی در طرح منطقه‌ای تکراری یک سطح همبند چندگانه باشد، که این باعث بروز مدارهای گوناگون حفره می‌شود که تکه‌هایی از چند کره را می‌پوشانند؛ مدارهای باز نیز وجود دارند، که در اثر دو هاس - وان‌الفن سهمی ندارند.

اثر دو هاس - وان الفن می‌تواند سطوح فرمی پیچیده‌تر را نیز ساده‌سازی کند. لذا برای نشان دادن آن‌که سطح فرمی سرب اساساً نظیر شکل ۱۳-۴ است؛ این اثر به‌کار می‌رود. تغییرات دیده شده در دورهٔ اندازه‌گیری شده حاصل از تغییر سمتگیری میدان، از [۱۰۰] تا [۱۱۰]، در شکل ۱۳-۱۴ نمایش داده شده است. نوسانهای α به حفره‌های منطقهٔ دوم در شکل ۱۳-۴ مربوط‌اند؛ نوسانهای β از یک مدار حفره بر روی یکی از "وجوه" مربعی در هیولای منطقهٔ سوم ناشی می‌شود؛ نوسانهای γ، از بسته‌های الکترونی در منطقهٔ چهارم ناشی می‌شوند (این بسته‌ها به طور عام سه دوره به وجود می‌آورند، چون برای هر جهت میدان بسته‌ها با سه سمتگیری متفاوت مشاهده می‌شوند). در گستره‌های محدودی از زاویه، ضربانهایی در نوسانهای γ دیده می‌شود، که نشانگر حضور دو دورهٔ γ_1 و γ_2 است؛ دورهٔ γ_2 از مدارهای حول بازوهای هیولای منطقهٔ سوم ناشی می‌شود.

در بحث ما در بارهٔ اثر دو هاس - وان الفن، اسپین الکترون نادیده گرفته شده است. به دلیل شکافتگی انرژیها به مقدار $2\mu_B B$، دو مجموعه از لوله‌های تراز لاندائو وجود دارد، یکی برای هر یک از دو حالت اسپین. هر مجموعه درون سطح فرمی با بسامد داده شده در معادلهٔ (۱۳-۳۰) به گونه‌ای حرکت می‌کند که دوره‌ای بودن نوسانها تحت تأثیر قرار نمی‌گیرد. با وجود این اگر ترازهای مربوط به اسپین بالا تقریباً در وسط راه بین ترازهای اسپینی پایین از سطح فرمی بگذرند، بزرگی نوسانها به مقدار قابل توجهی کاهش می‌یابد.

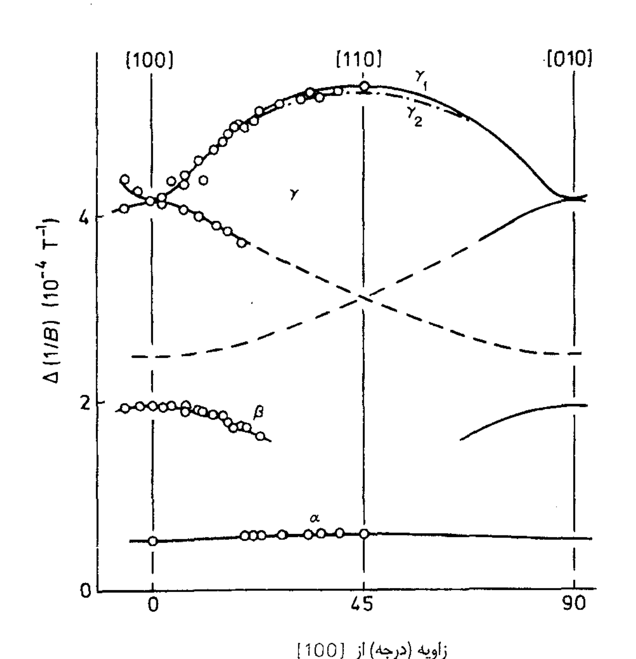


(الف) سطح فرمی مس، که تماس با وجوه شش گوشی منطقهٔ اول بریلوئن را نشان می‌دهد. نوسانهای دو هاس- وان الفن با دوره‌ای مشاهده می‌شوند که به مدار گردنی مشخص شده مربوط می‌شوند.



(ب) مدل طرحوار سطح فرمی مس در طرح منطقه‌ای تکراری که مدار "استخوان سگی" را نشان می‌دهد. این مدل از بیست وجهی‌های لوزی رخ ساخته شده است. اگر یک بیست وجهی لوزی رخ درون منطقهٔ اول بریلوئن با رأس‌های منطبق بر مراکز وجوه محاط شود دقیقاً نیمی از منطقه را پر می‌کند. سطوح فرمی مس، نقره و طلا ارتباط نزدیک با این طرح دارند. این سطوح، مساحتهای بزرگ تقریباً مسطحی متناظر با وجوه بیست وجهی دارند: رئوس [۱۰۰] درون منطقه گرد شده‌اند، حال آنکه رئوس [۱۱۱] در مرزهای منطقه گرد شده‌اند که گردنها را می‌سازند.

شکل ۱۳-۱۳



شکل ۱۳-۱۴: تغییر زاویه‌ای دوره‌های دو هاس- وان الفن در سرب. (با کسب مجوز از مأخذ *A. V. Gold, Phil. Trans. R. Soc. A* **251**, *85 (1958)* **اقتباس شده است)**

۱۳-۵ چرا الکترونها مستقل رفتار می‌کنند؟

در بحث مربوط به فلزات و نیمرسانا‌ها فرض کرده‌ایم که الکترونها رفتار مستقلی دارند. به ویژه شیوهٔ به دست آوردن قضیهٔ بلوخ در فصل ۱۱ تنها برای توابع موج ***تک ذره‌ای*** به کار می‌رود[1]. بنابراین اعتبار نظریه فلزات که در ابتدای این فصل ارائه شد، بر فرض الکترون مستقل استوار است. مقایسهٔ انرژیهایی که مطرح شده‌اند، نشان می‌دهد که این، تقریب بدی است؛ انرژی دافعهٔ کولنی دو الکترون، $e^2/4\pi\varepsilon_0 r$، به فاصلهٔ ۱Å، حدود $10\,eV$ است و این انرژی هم با انرژی فرمی و هم با انرژی برهم کنش یک الکترون با نزدیکترین یون مثبت، قابل مقایسه است. الکترونها به دلیل برهم‌کنش کولنی بیشتر مانند یک مایع رفتار می‌کنند تا یک گاز بدون برهم کنش. در این بخش توضیح می‌دهیم که چرا رفتار این مایع در پایین‌ترین حالت برانگیختهٔ آن مشابه گازی با ذرات تقریباً مستقل است.

۱- پیامدهای دوره‌ای بودن شبکه برای یک تابع موج بس ذره‌ای کمتر سرراست است.

۱۳-۵-۱ خنثایی الکتریکی در فلزات

در بخش ۵-۶-۲ دریافتیم که انحراف از خنثایی الکتریکی در یک نیمرسانای همگن، از طریق توزیع مجدد حاملهای اکثریت در مقیاسهای کوتاه فاصله‌ای و زمانی برطرف می‌شود. چگالی الکترونی بالاتر در فلزات مقیاسهای فاصله‌ای و زمانی را از این هم کمتر می‌کند؛ این مقیاسها به قدری کوتاه‌اند که در استخراج معادلهٔ حرکت مایع الکترونی می‌توان از برخوردها صرفنظر کرد[1]. به جای به کار بردن رسانندگی الکتریکی و ثابت پخش برای توصیف پاسخ در مقابل میدان الکتریکی و شیب غلظت، به ترتیب معادلات شتاب زیر را به کار می‌بریم:

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e\mathbf{E} \quad , \quad mn\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p$$

که در آن ∇p - شیب فشار مربوط به شیب غلظت است. از ترکیب این دو جمله داریم

$$mn\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -ne\,\mathbf{E} - \nabla p \qquad (۱۳-۳۴)$$

که معادلهٔ حرکت یک مایع باردار ایده‌آل (غیرچسبنده) است.

با به کار بردن جرم الکترون برهنه در معادلهٔ (۱۳-۳۴)، از آثار ساختار نواری چشم پوشی می‌کنیم و بنابراین برای یونهای مثبت، چگالی بار را از نظر فضایی یکنواخت فرض می‌کنیم. دافعهٔ الکترون – الکترون از طریق به کارگیری قانون گاوس،

$$div\,\mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} = \frac{-e(n-n_0)}{\varepsilon_0} \qquad (۱۳-۳۵)$$

برای میدان الکتریکی تولید شده توسط انحراف چگالی الکترونی از مقدار میانگین آن n_0، در محاسبه وارد می‌شود. فرض می‌کنیم این یک تقریب منطقی باشد که فشار در معادلهٔ (۱۳-۳۴) را مانند فشار مربوط به الکترونهای آزاد بگیریم؛ این فشار در مسئلهٔ ۳-۳ محاسبه شده است

$$p = \frac{2}{5}\, n\,\varepsilon_F \qquad (۱۳-۳۶)$$

۱- برای این کار باید مقیاس طول در مقایسه با مسافت آزاد میانگین الکترون کوچک باشد و مقیاس زمانی در مقایسه با زمان متوسط بین برخوردها کوتاه باشد. در بخش ۱۳-۵-۴ توضیح می‌دهیم که چرا برخوردها آن قدر قوی هستند که باعث رفتار مایع گونه و بدون مطرح کردن زمان واهلش خیلی کوتاه می‌شوند.

از این رو

$$-\nabla p = -\frac{۲}{۳}\ \varepsilon_F\ \nabla n \qquad (۱۳-۳۷)$$

که در آن از معادلهٔ (۳-۹) برای ε_F به صورت تابعی از n استفاده کرده‌ایم. با استفاده از معادلات (۱۳-۳۵) و (۱۳-۳۷) همراه با قانون پایستگی تعداد ذرات یعنی

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -div\ (n\mathbf{v}) \qquad (۱۳-۳۸)$$

این امکان وجود دارد که $\mathbf{v}$ و $\mathbf{E}$ و $\mathbf{p}$ را از معادله (۱۳-۳۴) حذف کنیم تا معادلهٔ زیر برای n به دست آید.

$$\frac{\partial^۲ n}{\partial t^۲} = \frac{۲}{۳}\ \frac{\varepsilon_F}{m}\ \nabla^۲ n - \frac{n_\circ\ e^۲}{m\varepsilon_\circ}\ (n - n_\circ) \qquad (۱۳-۳۹)$$

با فرض کوچک بودن $n - n_\circ$، $\mathbf{v}$ و $\mathbf{E}$ این معادله را خطی کرده‌ایم.

معادلهٔ (۱۳-۳۹) برای فلزات، مانسته معادلهٔ (۵-۶۶) برای نیمرساناهاست. این معادله از نظر دارا بودن مشتق مرتبهٔ دوم به جای مشتق مرتبهٔ اول دارای کیفیت متفاوتی است؛ این به آن علت است که در به دست آوردن این رابطه از برخوردها صرفنظر کرده‌ایم. حال بعضی از نتایج این معادله را توصیف می‌کنیم.

۱۳-۵-۲ نوسانهای پلاسما

در حد تغییرات مکانی آرام می‌توان از جملهٔ $\nabla^۲ n$ صرفنظر کرد و معادلهٔ (۱۳-۳۹) را به صورت زیر نوشت

$$\frac{d^۲ n}{dt^۲} = -\omega_p^۲\ (n - n_\circ) \qquad (۱۳-۴۰)$$

که در آن

$$\omega_p^۲ = \frac{n_\circ \varepsilon^۲}{m\varepsilon_\circ} \qquad (۱۳-۴۱)$$

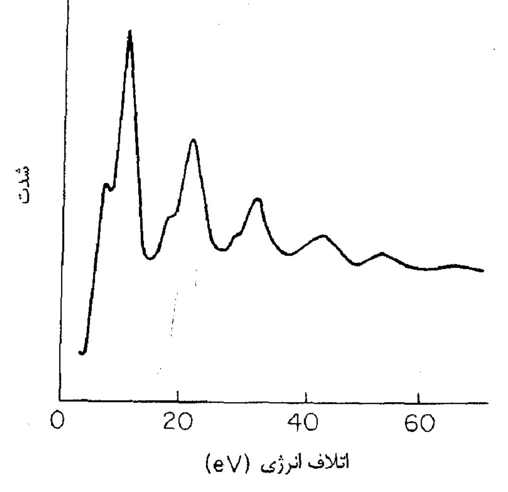
این یک معادلهٔ نوسانگر هماهنگ ساده با بسامد زاویه‌ای ω_p است. بنابراین هر گونه انحراف از خنثایی الکتریکی با طول موج بلند، با این بسامد نوسان می‌کند؛ این نوسانها را ***نوسانهای پلاسمایی*** می‌نامند و ω_p ***بسامد پلاسماست***. بسامد متناهی مربوط به حرکتهای با طول موج بلند از آنجا ناشی می‌شود که کاهش $1/r$ در برهم کنش کولنی آن را یک برهم کنش بلندبرد می‌کند[1].

۱- در مقابل در فصل ۲ که نیروهای کوتاه‌برد بین ذرات سدیم داریم دیدیم که، حرکتهای با طول موج بلند امواج صوتی‌ای هستندکه برای آنها وقتی $\lambda \to \infty$ داریم $\omega \to ۰$.

با درج $n_0 \approx 10^{29} m^{-3}$ در معادلهٔ (۱۳-۴۱) داریم $\omega_p \approx 10^{16} s^{-1}$. بنابراین کوانتوم انرژی $\hbar\omega_p$ مربوط به نوسانهای پلاسمایی از مرتبهٔ $10 eV$ است و آن قدر بزرگ است که نوسانهای پلاسمایی معمولاً به گونهٔ گرمایی در فلزات برانگیخته نمی‌شوند و مایع الکترونی، تا آنجا که به حرکتهای با طول موج بلند آن مربوط است، در حالت پایه باقی می‌ماند. با این وصف کوانتوم نوسانهای پلاسمایی، که **پلاسمون** نام دارد می‌تواند به وسیلهٔ عبور باریکه‌ای از الکترونهای سریع از یک ورقهٔ نازک برانگیخته شود. دیده می‌شود که الکترونها با از دست دادن مقادیر گسستهٔ انرژی متناظر با برانگیزش یک یا چند پلاسمون خارج می‌شوند (شکل ۱۳-۱۵). چون نوسانهای پلاسمایی بلندبرد هستند، الکترونهای زیادی درگیر هستند و بنابراین پلاسمونها را ***برانگیختگی‌های جمعی*** مایع الکترونی می‌نامند. توجه کنید که چون بازهٔ نوعی برخورد، τ، از مرتبهٔ $10^{-12} S$ است، داریم $\omega_p \tau \gg 1$ و چشم‌پوشی از برخوردها در استخراج رابطهٔ (۱۳-۳۹) توجیه می‌شود.

۱۳-۵-۳ استتار

چون حرکتهای بلندبرد جمعی مایع الکترونی به گونهٔ گرمایی برانگیخته نمی‌شوند، حرکت الکترونها شدیداً همبسته است؛ الکترونهای دیگر به شیوه‌ای خود را تنظیم می‌کنند که میدان کولنی بلندبرد الکترونهای منفرد را حذف می‌کنند. در فواصل کوتاه‌تر استتار ناکامل است و برای بررسی آن می‌توانیم معادلهٔ (۱۳-۳۹) را به کار بریم. یک بار نقطه‌ای ساکن e- در $\mathbf{r} = 0$ را



شکل ۱۳-۱۵ : اتلاف انرژی $2020 eV$ الکترونها پس از پراکندگی $90°$ توسط یک لایهٔ Mg. ستیغهای بزرگ نشان می‌دهند که اتلاف انرژی مضربی از $\hbar\omega_p$ است. ستیغهای کوچک یک اثر سطح هستند (کتاب کتیل را ببینید).
(با کسب مجوز از مرجع
C. J. Powell and J. B. Swann Phys. Rev. 116, 81 (1959)
اقتباس شده است)

نظر بگیرید. با قراردادن $\partial^2 n / \partial t^2 = 0$ در معادلهٔ (۱۳-۳۹) در می‌یابیم که پاسخ با تقارن کروی مایع الکترونی در مقابل این بار به قرار زیر است

$$\nabla_n^2 = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dn}{dr} \right) = \frac{(n-n_0)}{\lambda^2} \tag{۱۳-۴۲}$$

که در آن

$$\lambda = \left(\frac{2\varepsilon_F \varepsilon_0}{3n_0 e^2} \right)^{1/2} = \frac{1}{\omega_p} \left(\frac{2\varepsilon_F}{3m} \right)^{1/2} \approx \frac{v_F}{\omega_P} \approx 1\text{Å} \tag{۱۳-۴۳}$$

و برای ω_p معادلهٔ (۱۳-۴۱) را به کار برده‌ایم.

جواب معادلهٔ (۱۳-۴۲) عبارت است از (مسئلهٔ ۱۳-۹ را ببینید)

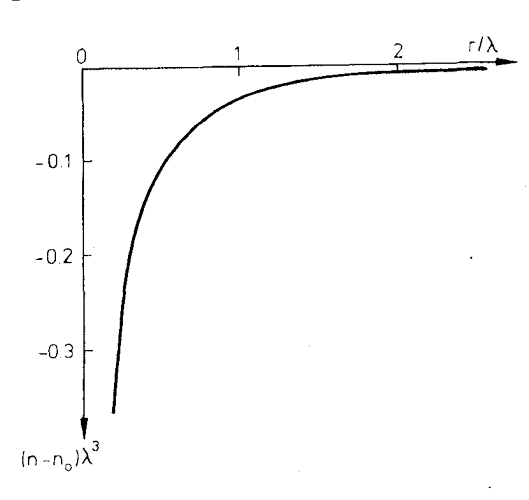
$$n - n_0 = -\frac{1}{4\pi\lambda^2} \frac{e^{-r/\lambda}}{r} \tag{۱۳-۴۴}$$

که در شکل ۱۳-۱۶ رسم شده است. مایع الکترونی از ناحیهٔ با اندازه‌ای از مرتبهٔ λ حول بار موجود در مبداء طرد می‌شود. کل بار طرد شده

$$\int_0^\infty (n-n_0)(-e)\, 4\pi r^2\, dr = \lambda^2 e \int_0^\infty r e^{-r/\lambda}\, dr = e$$

بار موجود در مبداء را درست موازنه می‌کند و این امر، جبران میدان کولنی بلند برد آن را توجیه می‌کند. با توجه به معادلهٔ (۱۳-۴۳)، طول استتار λ خیلی کوچکتر از مسافت آزاد میانگین الکترون است و این توجیه دیگری است برای صرفنظر کردن از برخوردها در به دست آوردن معادلهٔ (۱۳-۳۹).

بنابراین هر الکترون در یک فلز به وسیلهٔ یک حفرهٔ استتاری در مایع الکترونی احاطه



شکل ۱۳-۱۶: پاسخ ایستای مایع الکترونی در مقابل یک بار نقطه‌ای $-e$ در مبداء

می‌شود. وقتی الکترون درون فلز حرکت می‌کند حفرهٔ استتاری همراه با آن جابه جا می‌شود؛ انرژی بالای پلاسمون تعیین می‌کند که استتار، در سرعت متناهی، مؤثر باقی می‌ماند. این الکترون همراه با حفرهٔ استتاری آن است که به منزلهٔ یک ذرهٔ تقریباً مستقل عمل می‌کند؛ این ترکیب موجودی را تشکیل می‌دهد که **شبه ذره** نامیده می‌شود. به دلیل عدم حضور برانگیختگی‌های جمعی، حالتهای برانگیختهٔ پایین فلزات با گازی حاوی شبه ذراتی با برهم کنش ضعیف متناظرند. این، تابع موج یک شبه ذره است که از قضیهٔ بلوخ تبعیت می‌کند.

معادلهٔ (۱۳-۴۴) ***معادله توماس ـ فرمی*** برای استتار ایستای میدان کولنی بلند برد یک الکترون است و λ ***طول استتار توماس ـ فرمی*** است. این نتیجه معمولاً به روش اندکی متفاوت به دست می‌آید (صفحهٔ ۲۶۴ کتاب کیتل) و به دلیل آنکه حرکت الکترون را به حساب نمی‌آورد و الکترونها را به عنوان یک مایع پیوسته در مقیاس اتمی در نظر می‌گیرد، نتیجه‌ای تقریبی است. همچنین به دلیل آنکه هر الکترون را هم به عنوان یک ذرهٔ منفرد و هم به عنوان بخشی از مایع الکترونی زمینه در نظر می‌گیرد ناسازگار است. نظریه‌های اصلاح شده‌ای با درجه‌های متفاوت از پیچیدگی و ظرافت برای در نظر گرفتن برهم کنشهای الکترون - الکترون وجود دارند؛ مزیت رهیافت ساده اندیشانهٔ موجود در آن است که یک تصویر فیزیکی، برای آنچه اتفاق می‌افتد، ارائه می‌دهد.

۱۳-۵-۴ اصل طرد و استتار

پس از منظور کردن استتار برهم‌کنش کولنی مطابق بحث قبل، یک برهم کنش باقیمانده بین شبه ذرات با گستره‌ای از مرتبهٔ $1\,\text{Å}$ وجود دارد؛ این برهم کنش در اصل حذف می‌شود، مگر آنکه حفره‌های استتاری مربوط به شبه ذرات همپوشانی داشته باشند. این برهم‌کنش باقیمانده باید به یک سطح مقطع برخورد A از مرتبهٔ $1\,\text{Å}^2$ برای دو شبه ذره منجر شود. مطابق نظریهٔ جنبشی، مسافت آزاد میانگین مربوط به آن l مساوی با $1/nA$ و زمان واهلش برابر است با

$$\tau = \frac{l}{v_F} = \frac{1}{nAv_F} \qquad (۱۳-۴۵)$$

پهن‌شدگی حاصل در ترازهای انرژی تک ذره، از رابطهٔ عدم قطعیت انرژی - زمان زیر به دست می‌آید

$$\Delta\varepsilon = \frac{\hbar}{\tau} = \hbar n A v_F \approx \frac{nA}{k_F}\,\varepsilon_F \qquad (۱۳-۴۶)$$

با قراردادن $A \approx 1\,\text{Å}^2$، عبارت (nA/k_F) به سوی واحد میل می‌کند به گونه‌ای که پهن‌شدگی تراز، حتی با برهم‌کنش استتار شده از مرتبهٔ ε_F است و تصویر شبه ذره‌های مستقل ظاهراً به هم می‌ریزد.

طیف نشری پرتو X فلزات (بخش ۳-۲-۴) نشان می‌دهد که انرژی ذرات دارای عدم قطعیتی

از این مرتبه نیست و بنابراین طول عمر باید از مقدار پیش‌بینی شده توسط معادلهٔ (۱۳-۴۵) طولانی‌تر باشد. تصویر ذرهٔ مستقل به کمک اصل پاؤلی بر جای می‌ماند. برخورد بین دو ذره تنها در صورتی رخ می‌دهد که حالتهای خالی‌ای موجود باشند که ذرات با رعایت پایستگی انرژی و اندازه حرکت به آن حالتها پراکنده شوند. این فقط در صورتی امکانپذیر است که انرژی هر **دو** ذرهٔ برخوردکننده در گسترهٔ $k_B T$ از انرژی فرمی باشند؛ این تنها ناحیه‌ای است که در آن هم ترازهای پر و هم ترازهای خالی ممکن است یافت شوند. بدون اصل طرد، آهنگ کل برخورد به ازای واحد حجم برابر است با

$$w = \frac{n}{\tau} = n^{۲} A v_F$$

وقتی اصل طرد اعمال می‌شود، هر n در این عبارت به دلیل محدودیت فوق در انرژی، در ضریبی از مرتبهٔ T/T_F ضرب می‌شود، به گونه‌ای که آهنگ واقعی برخورد از مرتبهٔ زیر است.

$$w = n^{۲} A v_F \left(\frac{T}{T_F}\right)^{۲}$$

و زمان واهلش یک تک ذره برابر است با

$$\tau = \frac{n}{w} = \frac{(T_F/T)^{۲}}{nAv_F}$$

آنگاه، پهن‌شدگی صحیح تراز، با استفاده از معادلهٔ (۱۳-۴۶) چنین می‌شود

$$\Delta\varepsilon = \frac{\hbar}{\tau} \approx \frac{nA}{k_F} \varepsilon_F \left(\frac{T}{T_F}\right)^{۲} \approx k_B T \left(\frac{T}{T_F}\right)$$

که در آن همچون قبل $nA/k_F \approx ۱$، بنابراین پهن شدگی تراز در مقایسه با $k_B T$ کوچک است؛ پهن شدگی گرمایی تابع فرمی، و تصویر شبه ذرات مستقل محفوظ می‌ماند. در دمای اتاق $T_F/T \sim ۱۰۰$ و پهن‌شدگی تراز نوعاً برابر است با $k_B T/۱۰۰ \approx ۳\times ۱۰^{-۴}\, eV$ و زمان واهلش وابسته به آن برابر است با

$$\tau = \frac{\hbar}{\Delta\varepsilon} \approx ۲\times ۱۰^{-۱۲} s$$

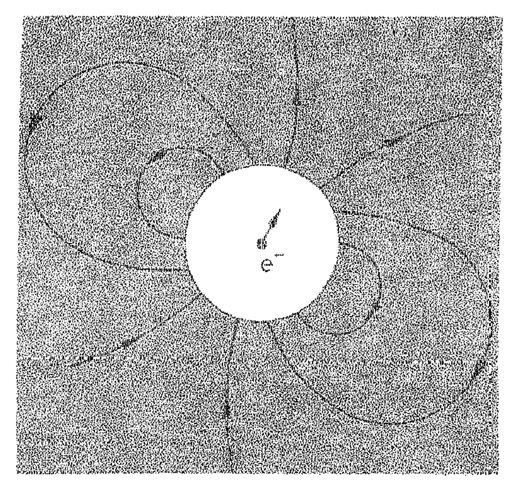
این زمان با ضریبی حدود ۱۰۰ طولانی‌تر از زمان واهلش حاصل از رسانندگی الکتریکی در بخش ۳-۳-۲ است. بنابراین از برخورد بین شبه ذرات معمولاً می‌توان صرفنظر کرد.

* ۱۳-۵-۵ آثار مایع فرمی

خواص شبه ذرات تقریباً مستقل، در مقایسه با خواص الکترونهای تقریباً مستقل اندکی تعدیل می‌شود. به عنوان مثال، وقتی یک شبه ذره درون فلز حرکت می‌کند، جریان برگشتی مایع الکترونی استتار شده در جرم مؤثر آن سهم دارد (شکل ۱۳-۱۷). به عبارت عامتر، هر گاه حالتهای اشغال شده به روشی همدوس، مثلاً توسط اعمال میدان الکتریکی یا مغناطیسی تغییر کنند، یک الکترون، اختلال را نه فقط به طور مستقیم بلکه همچنین از طریق برهم کنش آن با مایع الکترونی تعدیل شده حس می‌کند. لاندائو رهیافتی، موسوم به **نظریهٔ مایع فرمی لانداٸو**، برای منظور کردن تغییر حاصل در انرژی شبه ذره، معرفی کرد؛ این تغییر معمولاً برای شبه ذرات الکترونی در فلزات کوچک است، اما برای شبه ذرات اتمی در مایع ^3H_e در دماهای پایین بزرگ است.

*گذار مات

در بخش ۴-۳-۲ پیشنهاد کردیم که، به دلیل برهم کنش‌های الکترون - الکترون، ممکن است برای وجود یک حالت فلزی به یک چگالی بحرانی الکترونی نیاز باشد؛ به ازای چگالیهای کمتر از این چگالی الکترونها روی اتم‌ها جایگزیده می‌شوند. گذار از رفتار عایق به فلز ***گذار مات*** نامیده می‌شود و حال می‌توانیم این گذار را به صورت نیمه کمی برحسب استتار توصیف کنیم. آرایه‌ای از اتمهای هیدروژن را در نظر بگیرید[1]؛ در حالت عایق هر الکترون توسط جاذبهٔ کولنی



شکل ۱۳-۱۷: جریان برگشتی مایع الکترونی استتار شده حول یک الکترون. جریان برگشتی در جرم مؤثر شبه ذره سهم دارد.

۱- فرض می‌کنیم که بتوان به طریقی از تشکیل مولکول جلوگیری کرد.

نزدیکترین پروتون، مقید به یک اوربیتال اتمی است. در حالت فلزی الکترونها غیر جایگزیده‌اند و همان گونه که در بخش ۱۳-۵-۳ توصیف شد، مایع الکترونی، میدان کولنی پروتون را استتار می‌کند. پتانسیل استتار شدهٔ حاصل از یک پروتون عبارت است از (مسئلهٔ ۱۳-۱۰)

$$\frac{e}{۴\pi \varepsilon_{\circ} r} e^{-r/\lambda} \qquad (۱۳\text{-}۴۷)$$

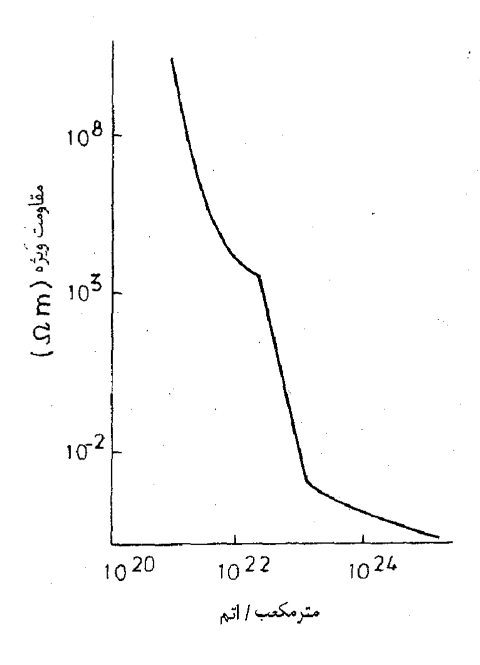
که درست برابر حاصلضرب پتانسیل کولنی برهنه در یک ضریب استتار $e^{-r/\lambda}$ است. حل معادلهٔ شرودینگر با این پتانسیل استتار شده نشان می‌دهد که حالتهای مقید تنها در صورتی وجود دارند که طول استتار λ بزرگتر از شعاع بور، $a_{\circ}$، باشد. بنابراین شرط $\lambda < a_{\circ}$ را برای رفتار جایگزیده (رفتار عایق) به دست می‌آوریم. با درج مقدار λ از معادلهٔ (۱۳-۴۳) و به کار بردن معادلهٔ (۳-۹) برای ε_F، شرط رفتار عایقی به قرار زیر است

$$n_{\circ} < \frac{\pi}{۱۹۲ a_{\circ}^{۳}} \approx ۱۰^{۲۹}\ m^{-۳} \qquad (۱۳\text{-}۴۸)$$

که در آن رابطهٔ $a_{\circ} = ۴\pi \varepsilon_{\circ} \hbar^{۲} / me^{۲}$ را نیز به کار برده‌ایم.

چگالی الکترون در بیشتر فلزات در حقیقت **کمتر** از این مقدار است، که نشان می‌دهد پتانسیل یونی برهنه، پتانسیل کولنی سادهٔ یک بار نقطه‌ای مثبت نیست. برای یک چگالی بار یکنواخت مثبت، چگالی بحرانی الکترون برای وقوع جایگزیدگی، کوچک‌تر است. ویگنر نشان داد که در این صورت انتظار می‌رود جایگزیدگی توسط بلوری‌شدن الکترونها در یک شبکهٔ منظم رخ دهد، که امروزه **شبکهٔ ویگنر** نامیده می‌شود. بحث اینکه چرا جایگزیدگی در چگالیهای پایین رخ می‌دهد آموزنده است چون ممکن است انتظار بر آن باشد که این امر در چگالی بالا که اثر مربوط به برهم کنشهای بین اتمها بزرگ‌تر است رخ دهد. سهم برهم‌کنشها در انرژی در حقیقت به صورت $n^{۳/۲}$ افزایش می‌یابد. (این را می‌توان با محاسبهٔ انرژی نقطهٔ صفر نوسانهای پلاسمایی به دست آورد). ولی انرژی جنبشی الکترونهای آزاد متناسب با $n\varepsilon_F$ است و بنابراین به صورت $n^{۵/۳}$ تغییر می‌کند. چون $۳/۲ < ۵/۳$، لذا در چگالی الکترونی بالا همیشه انرژی جنبشی غالب است و این، از حالتهای گسترده و رفتار فلزی حمایت می‌کند (بخش ۳-۲-۵ را ببینید).

گذار فلز - عایق به سادگی در نیمرساناها مشاهده می‌شود، چگالی حاملها در نیمرسانا می‌تواند با تغییر میزان آلایش تغییر کند. لذا در شکل ۵-۹ نمونهٔ ژرمانیوم با سنگین‌ترین آلایش در دماهای پایین رفتار فلزی به نمایش می‌گذارد، که این نشان آن است که الکترونها دیگر بر روی ناخالصیهای بخشنده جایگزیده نیستند. شکل ۱۳-۱۸ یک گذار عایق - رسانا در مقاومت ویژهٔ ژرمانیوم در $۲/۵K$ وقتی که چگالی ناخالصی وراء $۱۰^{۲۳} m^{-۳}$ افزایش یابد را نشان می‌دهد.



شکل ۱۳-۱۸ : وابستگی مقاومت ویژهٔ ژرمانیوم به چگالی ناخالصی در ۲/۵K. برای ناخالصی بیش از $۱۰^{۲۳}$ اتم بر مترمکعب مقاومت ویژه مستقل از دما است و رفتاری فلزی دارد. (با کسب مجوز از مأخذ زیر اقتباس شده است.
N. F. Mott, Phil. Mag (8). 6, 287 (1961))

۱۳-۶ امواج الکترومغناطیسی در فلزات

نوسانهای پلاسمایی اساساً امواج الکترومغناطیسی طولی با طول موج بلندند؛ چنین امواجی در فضای آزاد منتشر می‌شوند و برای انتشار آنها در درون فلزات، طبق معادلهٔ (۱۳-۳۹)، شرط $\omega > \omega_p$ ضروری است. در این بخش امواج الکترومغناطیسی عرضی را مورد توجه قرار می‌دهیم؛ برای این امواج $div\ \mathbf{E} = ۰$ است به‌گونه‌ای که، طبق معادلهٔ (۱۳-۳۵)، هیچ افت و خیزی در چگالی بار موجود نیست. اگر گذردهی نسبی الکتریکی و تراوایی مغناطیسی فلزات برابر واحد باشند، انتشار امواج عرضی با معادلات ماکسول به صورت زیر توصیف می‌شود

$$curl\ \mathbf{H} = \mathbf{j} + \varepsilon_0 \dot{\mathbf{E}} \qquad (۱۳-۴۹)$$

$$curl\ \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{B}} = -\mu_0 \dot{\mathbf{H}} \qquad (۱۳-۵۰)$$

با حذف میدان مغناطیسی بین این معادلات داریم

$$-curl\ curl\ \mathbf{E} = \nabla^2 \mathbf{E} = \mu_0 \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \qquad (۱۳-۵۱)$$

که در آن $c = 1/(\varepsilon_0 \mu_0)^{1/2}$ سرعت نور در فضای آزاد است.

در بسامدهای پایین، $\mathbf{J}$ با قانون اهم داده می‌شود، $\mathbf{j}=\sigma\mathbf{E}$، و جملهٔ حاوی $\partial\mathbf{j}/\partial t$ بسیار بزرگتر از جملهٔ جریان جابه‌جایی در طرف راست معادلهٔ (۱۳-۵۱) است. بنابراین معادلهٔ (۱۳-۵۱) یک معادلهٔ پخش برای $\mathbf{E}$ است و دارای جوابهایی با وابستگی زمانی نوسانی به شکل زیر است

$$\mathbf{E}=\mathbf{E}_{\circ}\, e^{-z/\delta}\cos(z/\delta-\omega t) \qquad (۱۳\text{-}۵۲)$$

که در آن

$$\delta=(۲/\omega\mu_{\circ}\sigma)^{۱/۲} \qquad (۱۳\text{-}۵۳)$$

عمق‌پوستی الکترومغناطیسی است (گرانت و فیلیپس[۳]، صفحهٔ ۳۸۸). بنابراین دامنهٔ موج به صورت نمایی با فاصله کاهش می‌یابد. برای امواج با $۱MHz$ در مس و در دمای $۳۰۰\ K$ ($\sigma=۰/۶\times۱۰^{۸}\Omega^{-۱}m^{-۱}$) طول کاهش δ مساوی $۶۵\mu m$ است.

در فلزات خاص در دماهای پایین مسافت آزاد میانگین الکترونی، l، بزرگ است و می‌تواند قابل مقایسه یا بزرگتر از عمق‌پوستی δ در بسامدهای میکرو موج باشد. بنابراین چگالی جریان دیگر با قانون اهم داده نمی‌شود، بلکه با یک رابطهٔ غیرموضعی داده می‌شود که در آن $\mathbf{j}$ در نقطهٔ $\mathbf{r}$ به مقدار $\mathbf{E}$ در تمام نقاط در حوالی $\mathbf{r}$، درگستره‌ای از مرتبهٔ l بستگی دارد. امواج الکترومغناطیسی عرضی باز هم مستهلک می‌شوند، ولی عمق‌پوستی در حد رسانندگی نامتناهی ($l\equiv$ بی‌نهایت) به جای آنکه آن گونه که با معادله (۱۳-۵۲) پیش‌بینی می‌شود به صفر میل کند، به یک مقدار متناهی میل می‌کند. این تغییر در رفتار به عنوان ***عمق‌پوستی بی‌هنجار*** نامیده می‌شود، و مقدار حدی δ در تک بلورها، برای فراهم آوردن اطلاعاتی در مورد سطح فرمی به کار رفته‌اند.

در بسامدهای فروسرخ و اپتیکی، لختی الکترونها مهمتر از پراکندگی می‌شود و بنابراین رفتار آنها با معادلهٔ شتاب زیر توصیف می‌شود.

$$\frac{d\mathbf{j}}{dt}=-ne\frac{d\mathbf{v}}{dt}=\frac{ne^{۲}}{m_e}\mathbf{E}$$

درج این رابطه در معادلهٔ (۱۳-۵۱) می‌دهد

$$\nabla^{۲}\mathbf{E}=\frac{۱}{c^{۲}}\left(\omega_P^{۲}\ \mathbf{E}+\frac{\partial^{۲}\mathbf{E}}{\partial t^{۲}}\right) \qquad (۱۳\text{-}۵۴)$$

که در آن ω_p بسامد پلاسمایی حاصل از معادلهٔ (۱۳-۴۱) است. اگر به دنبال جوابهای موج گونه که به صورت $e^{i(\mathbf{k}.\mathbf{r}-\omega t)}$ تغییر می‌کنند باشیم در آن صورت، با درج مقادیر، رابطهٔ پاشندگی زیر به دست می‌آید.

$$k^2 = \frac{\omega^2 - \omega_P^2}{c^2} \qquad (۱۳-۵۵)$$

برای $\omega < \omega_P$، k مجازی است و میدان الکتریکی به صورت نمایی بدون تغییر فاز کاهش می‌یابد. نور فرودی بر بلور از بیرون، انعکاس کامل خارجی می‌یابد، نظیر رستسترالن (بخش ۹-۱-۴). برای $\omega > \omega_P$، k حقیقی است و موج می‌تواند درون فلز منتشر شود. بسامد پلاسمایی معمولاً فرابنفش است، لایه‌های نازک بسیاری از فلزات در این ناحیه از طیف شفاف می‌شوند. معادلهٔ (۱۳-۵۵) پیش‌بینی می‌کند که یک فلز به گونه‌ای رفتار می‌کند که گویی به ازاء $\omega > \omega_P$ دارای ثابت دی‌الکتریک زیر است

$$\varepsilon = \frac{c^2}{(\omega/k)^2} = 1 - \frac{\omega_P^2}{\omega^2} \qquad (۱۳-۵۶)$$

که این نظیر معادلهٔ (۹-۱۹) است. اثر پراکندگی الکترون، که از آن صرفنظر کرده‌ایم، آن است که باعث استهلاک موج می‌شود.

مسایل ۱۳

۱۳-۱ نشان دهید که وقتی رابطهٔ پاشندگی به صورت $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ است. معادلات (۱۳-۱) و (۱۳-۱۷) به معادلات الکترون آزاد (۳-۸) و (۳-۲۸) منجر می‌شوند.

۱۳-۲ (الف) نشان دهید که برای رابطهٔ پاشندگی همسانگرد $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_e$، جرم مؤثر سیکلوترونی معادلهٔ (۱۳-۲۳) مساوی جرم مؤثر دینامیکی معادله (۱۳-۹) می‌شود.
(ب) معادلات (۱۳-۱۱) و (۵-۵۴) را برای محاسبهٔ تانسور جرم مؤثر یک الکترون در نزدیکی کمینهٔ نوار رسانش سیلیسیوم به کار برید. معادلهٔ (۱۳-۱۰) برای حرکت الکترونها در یک میدان مغناطیسی را تعمیم دهید و به این ترتیب معادلهٔ (۵-۵۸)، را برای بسامد تشدیدی سیکلوترونی بازیابی کنید.

۱۳-۳ در یک آزمایش تشدید سیکلوترونی در پتاسیم در $68GHz$، سه تشدید متوالی در میدانهای مغناطیسی ۰/۷۴، ۰/۵۹ و ۰/۴۹ تسلا مشاهده می‌شود. جرم مؤثر سیکلوترونی مدار مربوط به این سه تشدید را محاسبه کنید.

۱۳-۴ نشان دهید که از رابطه $\hbar\omega_c \approx \varepsilon_F$ نتیجه می‌شود که شعاع مدار سیکلوترونی کوچکتر از یک بسته موج الکترون است.

۱۳-۵ میدان مغناطیسی ثابت B در امتداد محور z را می‌توان با پتانسیل برداری $\mathbf{A} = (0, \mathrm{B}x, 0)$ نمایش داد. با به کار بردن هامیلتونی برای انرژی جنبشی یک الکترون در میدان مغناطیسی (معادلهٔ (c_2) در پیوست ج) نشان دهید که معادلهٔ شرودنیگر برای یک الکترون آزاد در این میدان عبارت است از

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\left(\frac{\partial}{\partial y}-\frac{ieBx}{\hbar}\right)^2\psi+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right]=E\psi$$

نشان دهید که این معادله جوابی به شکل زیر دارد.

$$\psi(x,y,z)=u(x)\,exp\left[i\left(\beta y+k_z z\right)\right]$$

که در آن $u(x)$ رابطه زیر را ارضا می‌کند.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2}+\frac{m}{2}\left(\frac{eBx}{m}-\frac{\hbar\beta}{m}\right)^2 u(x)=E' u(x)$$

و $E'=E-\hbar^2 k_z^2\,/\,2m$. معادلهٔ $u(x)$ معادلهٔ شرودینگر برای یک نوسانگر هماهنگ ساده به مرکز نقطهٔ $x=\hbar\beta/eB$ است؛ بسامد نوسانگر و در نتیجه ویژه مقادیر انرژی E' و Eی آن را به دست آورید.

۱۳-۶ مساحت سطح مقطع سطح فرمی مسئول نوسانهای دوهاس - وان الفن در شکل ۱۳-۱۱ را برآورد کنید. جواب خود را با مقدار نظیر برای کرهٔ فرمی الکترون آزاد مقایسه کنید. چگالی اتمی در مس $8/5\times10^{28}m^{-3}$ است. دمای بیشینه‌ای را که در آن، پدیدهٔ دوهاس - وان الفن در مس در میدان $10T$ مشاهده می‌شود حدس بزنید. اگر چگالی ناخالصی، n_i وزمان برخورد، τ با $n_i\tau=10^{14}m^{-3}s$ به یکدیگر مربوط شوند، این اثر، تا چه مقدار چگالی ناخالصی قابل مشاهده است؟

۱۳-۷ بسامد پلاسمایی منیزیم را از شکل ۱۳-۱۵ به دست آورید و جواب خود را با مقدار مورد انتظار از معادلهٔ (۱۳-۴۱) به ازای چگالی ***اتمی*** $4/3\times10^{28}m^{-3}$ مقایسه کنید.

۱۳-۸ نشان دهید که برخورد الکترونها باعث افت نوسانهای پلاسمایی می‌شود. نشان دهید که افت بحرانی، در چگالی الکترونی به اندازهٔ کافی کوچک رخ می‌دهد. غلظت بحرانی را وقتی که زمان پراکندگی $\tau=10^{-12}s$ باشد برآورد کنید. وقتی $\omega_p\tau\ll1$ باشد، چه رخ می‌دهد؟

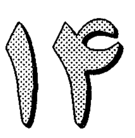
۱۳-۹ با درج مقادیر نشان دهید که معادلهٔ (۱۳-۴۴) به ازای $r\neq0$ معادلهٔ (۱۳-۴۲) را ارضا می‌کند. بار نقطه‌ای در $r=0$ است و حل معادله (۱۳-۴۴) واگرا می‌شود، به گونه‌ای که نمی‌توان $\nabla^2 n$ را در آن جا به آسانی محاسبه کرد. درست بودن جواب در این نقطه را با انتگرال‌گیری از معادلهٔ (۱۳-۴۲) روی کرهٔ کوچکی به مرکز $r=0$ نمایش دهید. وقتی شعاع کره به سمت صفر میل می‌کند، در طرف راست، بار نقطه‌ای غالب است؛ طرف چپ را می‌توان به یک انتگرال سطحی تبدیل کرد. تساوی دو طرف ضریب $1/4\pi\varepsilon_0$ در معادلهٔ (۱۳-۴۴) را تثبیت می‌کند.

۱۳-۱۰ نشان دهید که معادلهٔ (۱۳-۴۷) پتانسیل استتار شدهٔ یک پروتون را می‌دهد.

۱۳-۱۱. یک شکل تعدیل شده از معادلهٔ (۱۳-۴۸) را که مناسب حاملهای غیرتبهگن در یک نیمرساناست به دست آورید. به این ترتیب چگالی بحرانی آلاینده برای تشکیل یک نوار انرژی ناخالص در ژرمانیوم را محاسبه کنید. ($m_e = ۰/۲۲m$ و ۱۶= ثابت دی‌الکتریک = ε). آیا نتایج تجربی شکل ۱۳-۱۸ با این پیش‌بینی سازگارند؟

تا سال ۱۹۸۰ هیچکس انتظار نداشت که اثری مانند اثر کوانتومی هال وجود داشته باشد، پدیده‌ای که منحصراً به ثابتهای بنیادی بستگی دارد و بی‌نظمیهای درون نیمرسانا نظیر ناخالصیها یا نقصهای شبکه بر آن اثری نمی‌گذارد.

کلوس فون کلیتزینگ، سخنرانی جایزهٔ نوبل، (۱۹۸۶)



دستگاههای کم بعدی

۱۴-۱ مقدمه

تا به حال در این کتاب بحث ما تقریباً تماماً به خواص **حجمی** جامدهای بلورین معطوف بوده است. چنین خواصی را معمولاً می‌توان برحسب ضرایبی که از شکل و اندازهٔ نمونه مستقل‌اند مشخص کرد. بنابراین، به عنوان مثال، ظرفیت گرمایی ویژه (ظرفیت گرمایی به ازای واحد جرم) ضریبی است که می‌توان آن را در جرم نمونه ضرب کرد و ظرفیت گرمایی هر نمونهٔ حجیم را به دست آورد. وقتی یک یا بیشتر از ابعاد یک جامد به اندازهٔ کافی کاهش یابد، خواص آن، دیگر با این ضرایب حجمی مشخص نمی‌شود. در این صورت نمونه را به عنوان یک **دستگاه کم بعدی** *(LDS)*[1] توصیف می‌کنند. دستگاههای کم بعدی را می‌توان بر طبق تعداد ابعادی که کوچک‌اند دسته‌بندی کرد: لایه‌های نازک دو بعدی‌اند، چون فقط از ضخامت لایه کاسته شده است؛ سیمهای ظریف یک بعدی‌اند، زیرا در آنها فقط یک بعد، یعنی طول، بزرگ است؛ نقطه‌ها یا خالها صفر بعدی‌اند، زیرا در این مورد هر سه بعد کوچک است.

انحراف از رفتار حجمی وقتی رخ می‌دهد که اندازهٔ نمونه با طول موج برانگیختگی مهم درون جامد قابل مقایسه شود، پدیده‌ای که گاهی به عنوان **اثر کوانتومی اندازه** توصیف می‌شود. در این صورت ماهیت این برانگیختگیها و در نتیجه هر خاصیت وابسته به این

۱- *Low Dimensional System*

برانگیختگیها تغییر می‌کند. خواص دستگاههای کم بعدی ممکن است غالباً به روشهای کاملاً غیر منتظره خیلی متفاوت از ویژگیهای نمونه‌های حجیم باشند. در بخش زیر با بررسی مثال ویژهٔ الکترونهای مقید به یک لایه این نکته را روشن می‌کنیم؛ این دستگاه، **گاز الکترونی دو بعدی** *(2 DEG)* [1] نام دارد.

در خواص ترابری جامدها یک اثر کمتر اساسی ناشی از کاهش اندازهٔ نمونه زمانی مشاهده می‌شود که اندازهٔ نمونه با **مسافت آزاد میانگین** برانگیختگیها قابل مقایسه شود. در این مورد پدیده به عنوان **اثر اندازه** توصیف می‌شود. مثالی از اثر اندازه را می‌توان در بخش ۲-۸-۴ یافت. مسافت آزاد میانگین فونون در تک بلورهای خالص در دماهای پایین با ابعاد بلور قابل مقایسه می‌شود. در نتیجه رسانندگی گرمایی مؤثر به شکل و اندازهٔ نمونه بستگی دارد. آثار اندازه را می‌توان با در نظر گرفتن پراکندگی برانگیختگیها توسط سطح نمونه محاسبه کرد. به شرطی که طول موج برانگیختگیها در مقایسه با اندازهٔ بلور کوتاه بماند، ماهیت خود برانگیختگیها تغییری نمی‌کند.

۱۴-۲ گاز الکترون دو بعدی

۱۴-۲-۱ حالتهای الکترونی

در ابتدا برای سادگی فرض می‌کنیم که الکترونها نظیر شکل ۱۴-۱ (الف) توسط سدهای پتانسیل نامتناهی در $z=0$ و $z=d$ در لایه‌ای با ضمانت d مقید باشند. حرکت الکترونها در صفحهٔ xy نا مقید فرض می‌شود. رهیافت الکترون آزاد را به کار می‌بریم ولی با نسبت دادن جرم مؤثر m_e به الکترونها ساختار نواری ممکن و دیگر آثار را نیز منظور می‌کنیم. مانند مورد سه بعدی (بخش ۳-۲)، تابع موج الکترونها با حل معادلهٔ شرودنیگر به دست می‌آید ولی در اینجا شرایط مرزی زیر در لبه‌های لایه به کار می‌رود:

$$\Psi = 0 \quad \text{در} \quad z=0 \quad \text{و} \quad z=d \qquad (۱-۱۴)$$

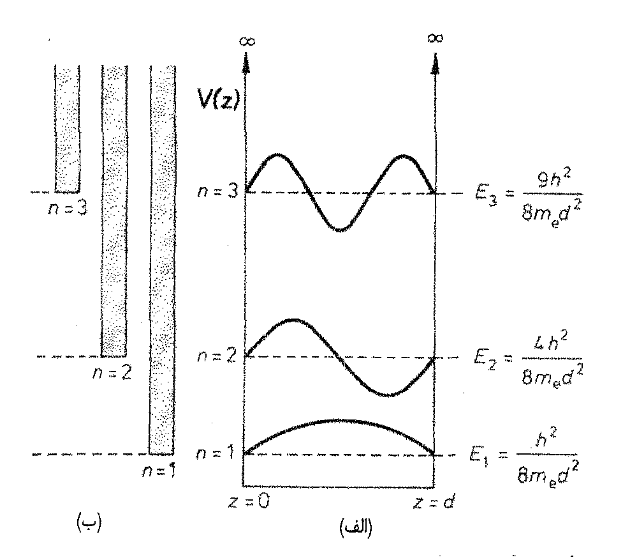
برای سهولت، استفاده از شرایط مرزی دوره‌ای در صفحهٔ xy را ادامه می‌دهیم (معادلهٔ (۳-۲) را ببینید):

$$\Psi(x+L,\ y+L,\ z) = \Psi(x,y,z) \qquad (۲-۱۴)$$

تابع موج (نابهنجار) حاصل مانند یک موج متحرک برای حرکت در صفحهٔ xy و یک موج ایستا برای حرکت در امتداد z به نظر می‌رسد

$$\Psi(x,y,z) = e^{ik_x x}\ e^{ik_y y}\ sin(k_z z) \qquad (۳-۱۴)$$

۱- *Two Dimensional Electron Gas*



شکل ۱۴-۱ (الف): توابع موج و انرژیهای پایین‌ترین سه حالت مقید مربوط به یک چاه پتانسیل مربعی نامتناهی یک بعدی به پهنای d. اگر الکترونها توسط چنین چاهی مقید به حرکت درون لایه‌ای در صفحهٔ xy باشند، وابستگی به z در تابع موج آنها با یکی از این حالتهای مقید متناظر است (معادلهٔ (۱۴-۳)). (ب) مساحتهای هاشورزده، ناحیهٔ انرژیهای الکترونی متناظر با هر حالت مقید یک الکترون درون لایه را مشخص می‌کند. افزایش انرژی درون هر ناحیهٔ هاشورزده، با افزایش حرکت در صفحهٔ xy متناظر است (افزایش $p^۲+q^۲$ در معادلهٔ (۱۴-۵)).

برای ارضای شرایط مرزی در معادلات (۱۴-۱) و (۱۴-۲) داریم

$$k_x = ۲\pi p/L \ , \qquad k_y = ۲\pi q/L \ , \qquad k_z = n\pi/d \qquad \text{(۱۴-۴)}$$

که در آن p، q و n اعداد صحیح‌اند. مقادیر k_x و k_y همانند مورد الکترونهای سه بعدی‌اند. وابستگی تابع موج به z متناظر است با حالتهای مانای یک چاه پتانسیل مربعی نامتناهی یک بعدی نظیر شکل ۱۴-۱ (الف)، و مقادیر مجاز k_z متناظراند با خوراندن تعداد صحیح از نیم - طول موجها در درون چاه.

انرژی وابسته به تابع موج معادلهٔ (۱۴-۳) برابر است با

$$\varepsilon = \frac{\hbar^۲}{۲m_e}\ (k_x^۲ + k_y^۲ + k_z^۲) = \frac{\hbar^۲}{۲m_e L^۲}\ (p^۲+q^۲) + \frac{n^۲ h^۲}{۸m_e\ d^۲} \qquad \text{(۱۴-۵)}$$

جملهٔ آخر متناظر است با ترازهای انرژی یک چاه پتانسیل مربعی متناهی یک بعدی به صورتی

که در شکل ۱۴-۱ (الف) نشان داده شده است، یعنی

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8 m_e d^2} \qquad (۱۴-۶)$$

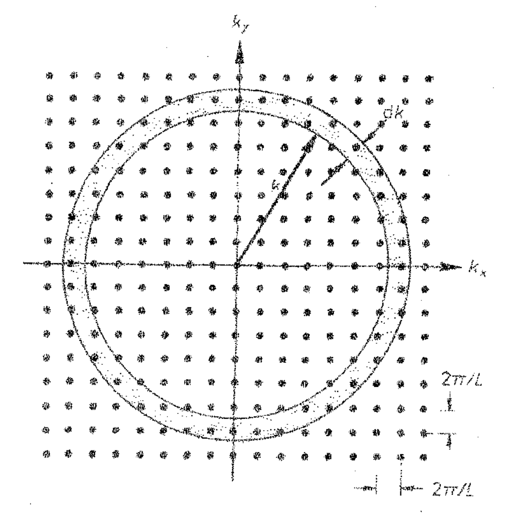
جملهٔ حاوی p^2+q^2 انرژی اضافی مربوط به حرکت در صفحهٔ xy است. آثار این طرح تراز انرژی را می‌توان در شکل ۱۴-۱ (ب) مشاهده کرد. پایین‌ترین حالت انرژی با $n=2$ (حالت با $p=q=0$) به اندازهٔ $3h^2/8m_e d^2$ از پایین‌ترین حالت با $n=1$ بالاتر است. برای d کوچکتر از حدود ۶۰ Å و $m_e=m$ این مقدار از $k_B T$ در دمای اتاق بیشتر می‌شود. بنابراین این امکان وجود دارد که تمامی الکترونها در دمای پایین بتوانند در حالت $n=1$ یخ بزنند. در نتیجه بستگی تابع موج به z همان بستگی حالت پایه در چاه پتانسیل مربعی نامتناهی است. حرکت الکترونها در امتداد z عملاً یخ می‌زند و رفتار آنها نظیر رفتار ذرات آزاد در یک فضای دو بعدی در صفحهٔ xy می‌شود.

این بحث را می‌توان به آسانی به یک تغییر واقعی‌تر پتانسیل در امتداد z تعمیم داد. یک چاه پتانسیل یک بعدی اختیاری یک یا چند حالت مقید دارد و توابع موج و انرژیهای این حالتها را می‌توان محاسبه کرد. برای لایه‌ای با یک چنین تغییر پتانسیل در امتداد z، وابستگی تابع موج به z، به یکی از این حالتهای مقید مربوط می‌شود و انرژی به شکل معادلهٔ (۱۴-۵) است که در آن جملهٔ آخر با ویژه مقدار انرژی یک بعدی متناظر تعویض می‌شود. برای تعیین آن حالتهای گاز الکترونی دو بعدی‌ای که در دمای $T=0$ اشغال شده‌اند، باید اصل پاؤلی را منظور کنیم، که فقط دو الکترون با اسپین‌های مخالف می‌توانند تابع موج فضایی یکسان داشته باشند. برای انجام این کار باید چگالی حالتهای مربوط به هر حالت مقید چاه پتانسیل را حساب کنیم.

۱۴-۲-۲ چگالی حالتها در گاز الکترونی دو بعدی

برای حالتهای مربوط به حالت مقید nام چاه پتانسیل، حرکت الکترونها در صفحهٔ xy با مقادیر k_x و k_y طبق معادلهٔ (۱۴-۴) توصیف می‌شود. با به کار بردن رهیافت معرفی شده در بخش ۲-۶-۲، که در بخش ۲-۳ برای الکترونهای آزاد سه بعدی به کار برده شد، k_x و k_y را به عنوان مؤلفه‌های یک بردار دو بعدی $\mathbf{k}$ در نظر می‌گیریم و مقادیر مجاز آن را در فضای $\mathbf{k}$ ی دو بعدی مانند شکل ۱۴-۲ رسم می‌کنیم. این حالتها بر روی یک شبکهٔ مربعی ساده به ضلع $2\pi/L$ قرار دارند و بنابراین مساحت فضای $\mathbf{k}$ به ازای هر حالت $\mathbf{k}$ مساوی $(2\pi/\mathrm{L})^2$ است. بزرگی بردار $\mathbf{k}$ مساوی $k=(k_x^2+k_y^2)^{1/2}$ است. تعداد حالتهای مجاز $\mathbf{k}$ در مساحت $2\pi k\,dk$ از فضای k بین دایره‌های به شعاع k و $k+dk$ برابر است با

$$g(k)\,dk = \frac{2\pi k\,dk}{(2\pi/L)^2} = \frac{L^2\,k dk}{2\pi} \qquad (۱۴-۷)$$



شکل ۱۴-۲ : بردار موجهای مجاز برای حرکت دو بعدی الکترونها در صفحهٔ xy. حالتها یک شبکهٔ مربعی ساده به ابعاد $۲\pi/L$ تشکیل می‌دهند. برای محاسبهٔ چگالی حالتها باید تعداد بردار موجها در حلقهٔ دایره‌ای هاشور خورده بین k و $k+dk$ تعیین شود.

معادلهٔ (۱۴-۵) برای انرژی حالتها را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\varepsilon = \frac{\hbar^{۲} k^{۲}}{۲m_e} + E_n \qquad (۱۴-۸)$$

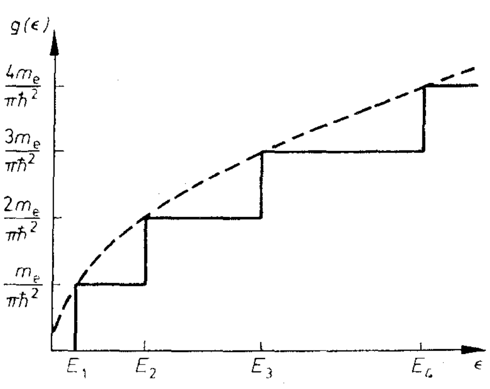
که برای الکترونهای مقید در یک چاه پتانسیل مربعی نامتناهی، E_n توسط معادلهٔ (۱۴-۶) بیان می‌شود. برای به دست آوردن چگالی حالتها به ازای واحد گسترهٔ انرژی، $g(\varepsilon)$، در **واحد سطح لایه** ($L^{۲}=۱$) رابطهٔ $g(\varepsilon)\,d\varepsilon = ۲g(k)\,dk$ را به‌کار می‌بریم که در آن ضریب ۲ ناشی از دو حالت اسپینی ممکن برای الکترون است. بنابراین، برای n ثابت داریم

$$g(\varepsilon) = ۲g(k)\frac{dk}{d\varepsilon} = \frac{m_e}{\pi\hbar^{۲}} \qquad (۱۴-۹)$$

که در آن معادلات (۱۴-۷) و (۱۴-۸) را به کار گرفته‌ایم. بنابراین چگالی حالتهای الکترونی دو بعدی مربوط به هر حالت مقید چاه پتانسیل، مستقل از انرژی است.

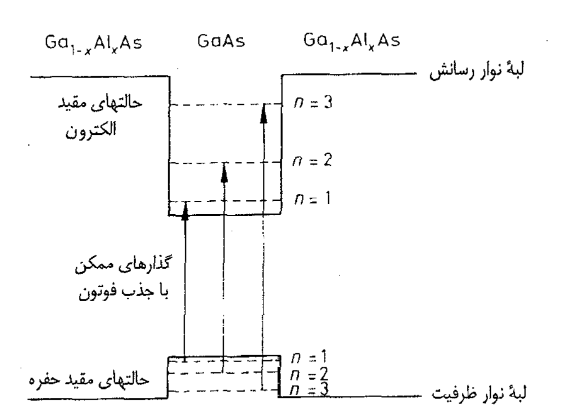
با جمع چگالیهای مربوط به همهٔ حالتهای مقید، چگالی کل مطابق شکل ۱۴-۳ به دست می‌آید. با افزایش ضخامت لایه، انرژیهای حالتهای مقید بیشتر به هم نزدیک می‌شوند به گونه‌ای که مشاهدهٔ پله‌های موجود در چگالی حالتها مشکل‌تر می‌شود. به این ترتیب چگالی حالتها به تدریج به شکل سهمیوار هموار که مناسب الکترونهای آزاد سه بعدی به صورتی که در شکل ۱۴-۳ با منحنی خط چین مشخص شده است، میل می‌کند.

یک چاه پتانسیل برای مقید کردن الکترونها در یک لایهٔ نازک را می‌توان در نیمرسانای با



شکل ۱۴-۳ : چگالی حالتها به ازای واحد سطح برای الکترونهای آزاد در یک لایهٔ نازک. E_1 و E_2... انرژی حالتهای مقید برای پتانسیل مقید کنندهٔ الکترونها درون لایه‌اند (شکل ۱۴-۱ (الف) را ببینید). منحنی خط چین وابستگی چگالی حالتها به انرژی را برای الکترونهای سه بعدی در لایه‌ای با ضخامت زیاد نشان می‌دهد.

ساختار پیوندگاه ناهمجنس که با شگرد MBE آماده شده است ایجاد کرد (بخش ۶-۶ را ببینید)[1] با ساندویچ کردن یک لایهٔ $Ga\,As$ بین لایه‌های ماکروسکوپی $Ga_{1-x}\,Al_x\,As$ یک چاه پتانسیل در لبهٔ نوار رسانس همانند شکل ۶-۱۳، به وجود می‌آید. شکل ۱۴-۴ انرژی حالتهای مقید را برای الکترونها در یک چاه یک بعدی به این شکل نشان می‌دهد. پلهٔ موجود در لبهٔ نوار ظرفیت برای حفره‌ها به منزلهٔ یک چاه پتانسیل عمل می‌کند. (یادآور می‌شود که انرژی حفره **منفی** انرژی الکترون است)؛ انرژیهای حالتهای مقید برای حفره‌ها نیز در شکل ۱۴-۴ نشان داده شده‌اند.



شکل ۱۴-۴ : حالتهای مقید مربوط به یک لایهٔ نازک $GaAs$ که بین دو لایهٔ ضخیم $Ga_{1-x}\,Al_x\,As$ ساندویچ شده‌است (ترازهای انرژی با رعایت مقیاس رسم نشده‌اند). گذارهای مجاز همراه با جذب فوتون نشان داده شده‌اند، این گذارها به آستانهٔ جذب در بسامدهای داده شده در معادلهٔ (۱۴-۱۰) منجر می‌شوند.

۱- یک گاز دو بعدی الکترونی را می‌توان در لایهٔ وارون یک **MOSFET** نیز ایجاد کرد(بخش ۶-۵). این دستگاه این مزیت را دارد که غلظت الکترونی آن را می‌توان به سادگی با تغییر پتانسیل دریچه تغییر داد.

چگالی حالتها در لایهٔ $GaAs$ را می‌توان با اندازه‌گیری جذب تابش الکترومغناطیس ناشی از برانگیختگی یک الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش بررسی کرد. چون طول موج تابش در مقایسه با پهنای چاه بلند است، گذارها تنها بین حالتهایی رخ می‌دهد که برای آنها تغییر فضایی تابع موج مشابه باشد؛ این، به قاعده گزینش $\Delta n = 0$ برای جذب منجر می‌شود. بنابراین گذارهای مجاز آنهایی هستند که در شکل ۱۴-۴ مشخص شده‌اند. بستگی جذب به بسامد باید وابستگی پله -گونهٔ چگالی حالتها به انرژی را نشان دهد؛ پله‌های جذب باید در بسامدهای ω_n رخ دهد که با رابطهٔ زیر داده می‌شوند

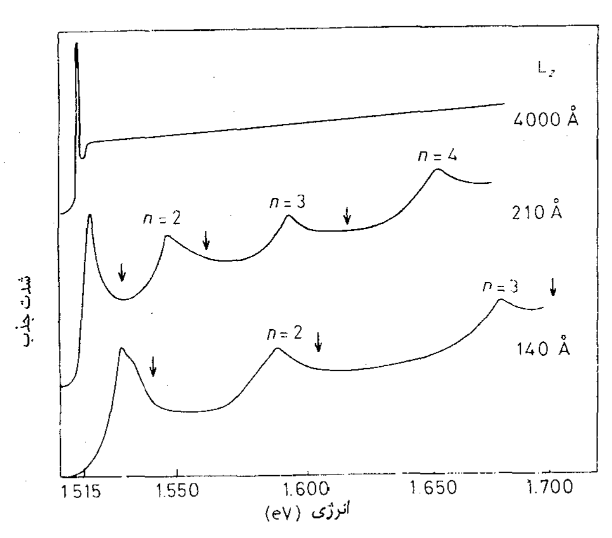
$$\hbar \omega_n = E_{c_n} - E_{v_n} \qquad (10\text{-}14)$$

که در آن $E_{c_n} - E_{v_n}$ مطابق شکل ۱۴-۴ اختلاف انرژی بین حالتهای مقید nام در نوارهای رسانش و ظرفیت است. طیفهای جذبی اندازه‌گیری شده برای لایه‌های $GaAs$ به ضخامتهای ۱۴۰ Å، ۲۱۰ Å و ۴۰۰۰ Å در شکل ۱۴-۵ نشان داده شده‌اند و ساختار پله‌ای مورد انتظار برای دو لایهٔ نازکتر به وضوح مشاهده می‌شود.

پیکانها نشانگر بسامدهایی‌اند که در آنها پله را انتظار داریم (مسئلهٔ ۱۴-۱ را ببینید). آستانهٔ جذب با ستیغهای در انرژیهایی درست زیر این مقادیر پیش‌بینی شده مشخص شده است. این نتایج از وجود یک حالت مقید بین الکترون و حفرهٔ آفریده شده ناشی می‌شود و کاهش انرژی ستیغ نسبت به مقدار مورد انتظار تعیین انرژی بستگی زوج الکترون - حفره را مقدور می‌سازد. دستگاه الکترون - حفرهٔ مقید **اکسیتون** نامیده می‌شود (مسئله ۱۴-۲ را ببینید). یک ستیغ اکسیتونی در منحنی جذب لایهٔ $GaAs$ به ضخامت ۴۰۰۰ Å به وضوح دیده می‌شود، اما ساختار پله -گونه ناپدید شده است. این نشانگر آن است که نظیر حالت سه بعدی. چگالی حالتها به صورت منحنی هموار در آمده است.

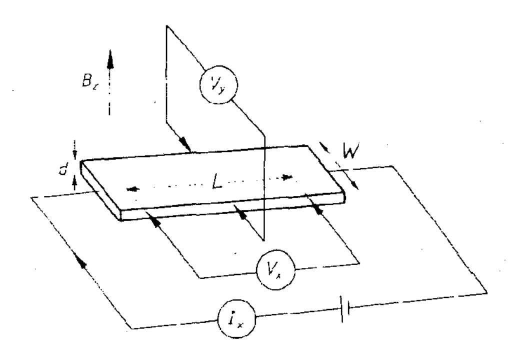
۱۴-۳ اثر کوانتومی هال

شاید برجسته‌ترین خاصیت دستگاههای دو بعدی الکترونی اثر کوانتومی هال باشد که وقتی یک میدان مغناطیسی قوی عمود بر لایهٔ دو بعدی در دماهای پایین اعمال شود مشاهده می‌شود. هندسهٔ شکل ۱۴-۶ را در نظر می‌گیریم. یک لایه مستطیلی به ضخامت d دارای ابعاد L و W به ترتیب در جهتهای x و y است. جریان I_x در جهت x اعمال می‌شود و در حالی که میدان مغناطیسی در جهت z عمود بر لایه اثر می‌کند ولتمترها ولتاژهای طولی و عرضی V_x و V_y را اندازه می‌گیرند. با استفاده از ولتاژهای اندازه‌گیری شده می‌توان میدان الکتریکی طولی و عرضی، $E_x\ (=V_x/L)$ و $E_y\ (=V_y/w)$، را تعیین کرد. نتایج اندازه‌گیریها را می‌توان توسط دادن مقادیر مقاومت ویژهٔ دو بعدی طولی و عرض، ρ_L و ρ_T که به صورت زیر تعریف



شکل ۱۴-۵: جذب اندازه‌گیری شده برای تابش الکترومغناطیسی به صورت تابعی از انرژی فوتون، برای لایه‌های $GaAs$ به ضخامت‌های ۴۰۰۰ Å، ۲۱۰ Å و ۱۴۰ Å. پیکانها انرژیهایی را مشخص می‌کنند که در آنها انتظار وقوع آستانهٔ جذب برای گذارهای حاوی حالت مقید nام مطابق شکل ۱۴-۴ را داریم. منحنی جذب بعد از ستیغ اکسیتونی در لایهٔ با ضخامت ۴۰۰۰ Å، هموار است، که نشانگر رفتار سه بعدی است. (اقتباس با اجازه از

R. Dingle, W. Wiegmann and C. H. Henry Phys, Rev. Lett. **33**, *827 (1974)).*



شکل ۱۴-۶: هندسهٔ اندازه‌گیری اثر هال در یک دستگاه الکترونی دو بعدی

می‌شوند ارائه کرد،

$$E_x = \rho_L J_x \quad , \quad E_y = \rho_T \, j_x \qquad \text{(۱۴-۱۱)}$$

که در آن J_x چگالی جریان دو بعدی است که به صورت جریان به ازای واحد پهنای لایه تعریف

می‌شود ($J_x = I_x/W$). توجه کنید که مقاومتهای ویژهٔ دو بعدی که به این طریق تعریف می‌شوند برحسب اهم اندازه‌گیری می‌شود نه اهم متر نظیر مقاومت ویژهٔ سه بعدی، مقاومت ویژهٔ عرضی ρ_T، اثر هال را به طور کمی توصیف می‌کند

سودمند است که نخست محاسبهٔ اثر هال در بخش ۳-۳-۵ را برای محاسبه رفتار مورد انتظار از ذرات کلاسیکی به‌کار ببریم. میدانهای الکتریکی در جهتهای xو yبا معادلات (۳-۳۷) بیان می‌شوند، که می‌توان نوشت

$$E_x = -\frac{m_e}{e\tau} v_x = \frac{m_e}{e\tau} \frac{j_x}{ne} = \frac{m_e}{ne^{۲}\tau} \frac{I_x}{Wd} = \frac{m_e}{nde^{۲}\tau} J_x$$

$$E_y = v_x B = -\frac{j_x B}{ne} = -\frac{I_x B}{W dne} = -\frac{B}{nde} J_x \tag{۱۲-۱۴}$$

مقایسهٔ معادلات (۱۴-۱۱) با معادلات (۱۴-۱۲) ما را در پیش‌گوییهای کلاسیکی زیر برای ρ_L و ρ_T یاری می‌کند.

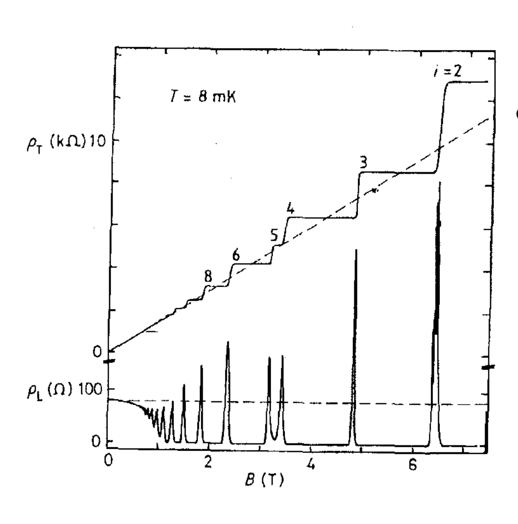
$$\rho_L = \frac{m_e}{n_A e^{۲}\tau} \quad , \quad \rho_T = -\frac{B}{n_A e} \tag{۱۳-۱۴}$$

که در آن n_Aرا به عنوان چگالی الکترونی دو بعدی در نظر گرفته‌ایم؛ n_Aتعداد الکترونها به ازای واحد سطح است و از طریق رابطهٔ $n_A = nd$ به چگالی حجمی مربوط می‌شود. معادلات (۱۴-۱۳) تنها در تعویض $n \to n_A$ با معادلات سه بعدی متناظر یعنی معادلات (۳-۲۷) و (۳-۳۸) تفاوت دارند. معادلات (۱۴-۱۳) پیش‌بینی می‌کنند که ρ_L مستقل از Bاست و ρ_Tبه طور خطی با B افزایش می‌یابد.

شکل (۱۴-۷) مقادیر اندازه‌گیری شده برای ρ_L و ρ_T را به صورت توابعی از میدان مغناطیسی برای الکترونهای درون یک نیمرسانا با ساختار پیوندگاه غیرهمجنس مانند شکلهای ۶-۱۳ و ۱۴-۴ نشان می‌دهد. الکترونها در لایهٔ نازک $Ga\ As$بین دولایهٔ $Ga_{۰/۷۱}\ Al_{۰/۲۹}\ As$ قرار گرفته‌اند. خط چینها رفتار کلاسیکی که توسط معادلات (۱۴-۱۳) پیش‌بینی شده است را نشان می‌دهند؛ نتایج تجربی بسیار متفاوت‌اند. مقاومت ویژهٔ عرضی، که مقیاسی از اثر هال است، در میدانهای بالا به صورت پله‌ای افزایش می‌یابد. مقدار ρ_Tدر طول قسمتهای افقی پله‌ها با مقداری که با رابطهٔ زیر به ثابت‌های بنیادی hو eمربوط می‌شود بسیار ثابت می‌ماند

$$\rho_T = -\frac{h}{ie^{۲}} = -\frac{۲۵۸۱۲/۸\,\Omega}{i} \tag{۱۴-۱۴}$$

که در آن iعدد صحیح است. مقادیر عدد صحیح iبرای پله‌ها در شکل ۱۴-۷ نشان داده شده‌اند.



شکل ۱۴-۷ : مؤلفه‌های مقاومت ویژهٔ طولی و عرضی در یک ساختار غیرهمجنس $GaAs - Ga_{۰/۷۱} Al_{۰/۲۹} As$ به صورت تابعی از میدان مغناطیسی اعمال شده در دمای $T = ۰/۸ \, mK$. خط چینها رفتار پیش‌بینی شده توسط معادلات (۱۴-۱۳) را مشخص می‌کنند. اعداد صحیح i مقادیر ρ_T را در کفه‌ها توسط معادلهٔ (۱۴-۱۴) تعیین می‌کنند. (اقتباس با اجازه از
K. von Klitzing, Physica **126**, *B+C, 242 (1984)*

در ناحیه‌ای که ρ_T ثابت است، مقاومت ویژهٔ طولی ρ_L تا حد قابل اغماضی کوچک است.

خواننده ممکن است به طور منطقی انتظار داشته باشد که ناچیز بودن ρ_L به رسانندگی طولی نامتناهی منجر شود. برای مشاهدهٔ آنکه چنین وضعیتی پیش نمی‌آید، باید معادلات (۱۴-۱۱) را برای وضعیتی تعمیم دهیم که در آن جریان در یک جهت اختیاری در صفحهٔ xy شارش کند؛

$$E_x = \rho_L J_x - \rho_T J_y$$
$$E_y = \rho_T J_x + \rho_L J_y \qquad (۱۵\text{-}۱۴)$$

با معکوس کردن این معادلات، چگالی جریان حاصل توسط میدان الکتریکی اعمالی در یک جهت اختیاری را می‌توان به دست آورد. بنابراین

$$J_x = \sigma_L E_x - \sigma_T E_y$$
$$J_y = \sigma_T E_x + \sigma_L E_y \qquad (۱۶\text{-}۱۴)$$

که در آن مؤلفه‌های رسانندگی دو بعدی عبارتند از

$$\sigma_L = \frac{\rho_L}{\rho_L^۲ + \rho_T^۲} \quad \text{و} \quad \sigma_T = -\frac{\rho_T}{\rho_L^۲ + \rho_T^۲} \qquad (۱۷\text{-}۱۴)$$

معادلات (۱۴-۱۷) این خاصیت تعیین کننده را دارا هستند که اگر ρ_L صفر شود ولی ρ_T مقدار

معینی داشته باشد σ_L نیز صفر می‌شود. بنابراین مقاومت ویژه و رسانندگی طولی به طور همزمان صفر می‌شوند. این نتیجه در عمل به آن معناست که جریان اعمالی فقط یک میدان الکتریکی عرضی ایجاد می‌کند و میدان الکتریکی اعمالی تنها یک جریان عرضی تولید می‌کند.

رفتار غیرعادی گاز الکترون دو بعدی که در شکل ۱۴-۷ نمایش داده شده است به **اثر کوانتومی هال** معروف است، و برای فهم آن باید ماهیت حالتهای الکترونی یک گاز الکترونی دو بعدی در میدان مغناطیسی را بررسی کنیم. فرض می‌کنیم که چگالی الکترونی به قدر کافی پایین باشد که الکترونها جملگی در پایین‌ترین حالتهای مقید پتانسیل مستقر باشند. در این صورت حرکت الکترونها در جهت عمود بر لایهٔ دو بعدی کاملاً منتفی است. در حضور میدان عمودی، حرکت در درون لایه، دیگر نظیر معادلهٔ (۱۴-۳) با امواج تخت توصیف نمی‌شود زیرا، همان گونه که قبلاً در بخش ۱۳-۴ توصیف کردیم، اثر میدان مغناطیسی بر الکترونهای آزاد آن است که باعث می‌شود این الکترونها در مدارهای سیکلوترونی دایره‌ای عمود بر میدان حرکت کنند. انرژی این ترازهای لاندائو با معادلهٔ (۱۴-۸) داده نمی‌شود بلکه با مانستهٔ دو بعدی معادلهٔ (۱۳-۲۶) مشخص می‌شود

$$E = E_{۱} + (n + \frac{۱}{۲})\hbar\omega_C \pm \mu_B B \qquad (۱۴-۱۸)$$

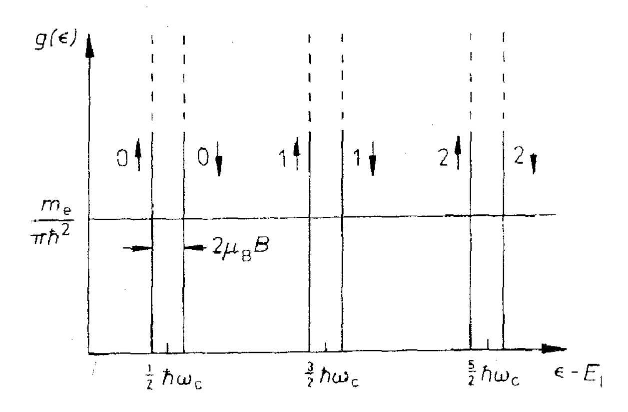
که در آن $E_{۱}$ پایین‌ترین انرژی حالت مقید چاه پتانسیل و

$$\omega_C = \frac{eB}{m_e} \qquad (۱۴-۱۹)$$

بسامد سیکلوترونی است. جملهٔ آخر در معادلهٔ (۱۴-۱۸) مربوط به گشتاور مغناطیسی اسپینی الکترون است؛ μ_B مگنتون بور است (معادلهٔ (۷-۵)).

چگالی حالتهای مربوط به ترازهای لاندائو در شکل (۱۴-۸) نمایش داده شده است؛ که به چگالی ثابت (معادلهٔ (۱۴-۹)) در غیاب میدان افزوده شده است. تعداد حالتهای مربوط به هر تراز لاندائو متناهی است اما، چون پهنای تراز صفر است، چگالی حالتها نامتناهی است. مانند حالت سه بعدی (بخش ۱۳-۴-۳)، تعداد حالتهای مربوط به هر تراز لاندائو را می‌توان با این شرط لازم که میانگین چگالی حالتها در حضور و در غیاب میدان یکسانند تعیین کرد. از شکل ۱۴-۸ می‌بینیم که در گسترهٔ انرژی $\hbar\omega_C$ دو تراز لاندائو وجود دارد(یکی برای هر حالت اسپینی)؛ اگر هر تراز حاوی N_L حالت باشد در آن صورت میانگین چگالی حالتها در حضور میدان مساوی $۲N_L / \hbar\omega_c$ می‌شود. با مساوی قرار دادن این مقدار با چگالی حالتها در غیاب میدان (معادلهٔ (۱۴-۹)) مقدار

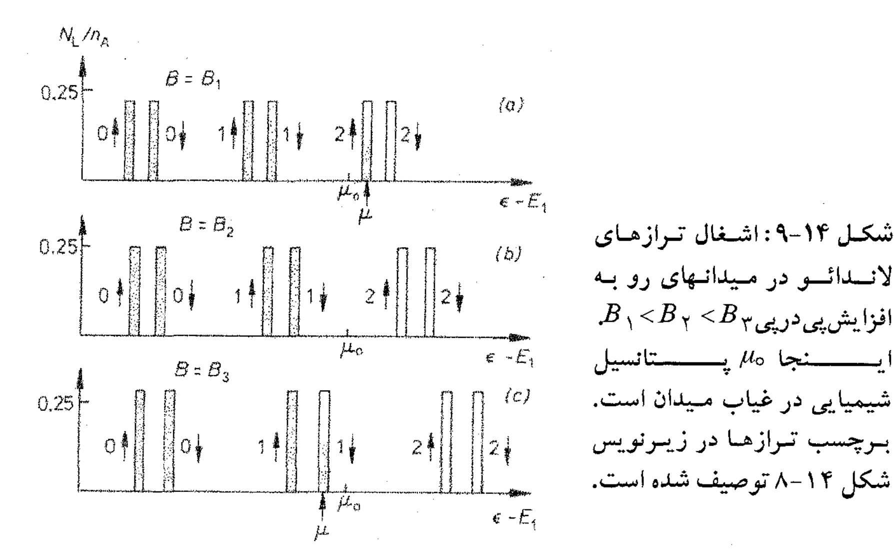
$$N_L = \frac{eB}{h} \qquad (۱۴-۲۰)$$



شکل ۱۴-۸: چگالی حالتهای گاز الکترونی دو بعدی در میدان مغناطیسی. خطوط عمودی چگالی نامتناهی حالتها را در انرژیهای ترازهای لاندائو طبق معادلهٔ (۱۴-۱۸) مشخص می‌کنند. پیکانها جهت گشتاور مغناطیسی الکترون را مشخص می‌کنند. اگر $m_e = m$، در آن صورت شکافتگی اسپینی و شکافتگی سیکلوترونی با هم مساوی‌اند (در نتیجه $\hbar\omega_C = ۲\mu_B B$). خط افقی در $g(\varepsilon) = m_e/\pi\hbar^۲$ چگالی ثابت حالتها در غیاب میدان را نشان می‌دهد (به شکل ۱۴-۳ برای $E_۱ < \varepsilon < E_۲$ مراجعه کنید). ترازهای لاندائو با مقادیر n در معادلهٔ (۱۴-۱۸) و سمتگیری اسپین مشخص می‌شوند؛ برای مثال، تراز ↑۱، به n=۱ و علامت پایینی (منفی) در معادلهٔ (۱۴-۱۸) مربوط می‌شود.

به ازای واحد مساحت لایهٔ دو بعدی به دست می‌آید.

بنابراین با افزایش میدان مغناطیسی تعداد حالتهای مربوط به هر تراز لاندائو افزایش می‌یابد و در نتیجه تعداد ترازهای لازم برای جای دادن الکترونها کاهش می‌یابد. اگر دما آن قدر پایین باشد (یا میدان آن قدر بالا) که برانگیختگی گرمایی الکترون از یک تراز لاندائو به تراز دیگر رخ ندهد، به وضعیتی می‌رسیم که در شکل ۱۴-۹ نشان داده شده است. در میدان $B_۱$ (شکل ۱۴-۹ (الف)) پایین‌ترین چهار تراز لاندائو پراند و بخشی از پنجمین تراز نیز پر است. چون در انرژی این تراز حالتهای اشغال شده و اشغال نشده هر دو با هم وجود دارند، باید پتانسیل شیمیایی الکترونها بر این انرژی منطبق باشد. با افزایش میدان، انرژی تراز پنجم و در نتیجه پتانسیل شیمیایی افزایش می‌یابد. ولی، تعداد الکترونها در این تراز کاهش می‌یابد زیرا الکترونهای بیشتری می‌توانند در چهار تراز پایین‌تر جای داده شوند. شکل ۱۴-۹ (ب) وضعیت در میدان $B_۲$ را نشان می‌دهد که در آن اشغال تراز پنجم به صفر میل می‌کند. در میدان باز هم بالاتر $B_۳$ (شکل ۱۴-۹ (ج)) این تراز لانداوی چهارم است که بخشی از آن اشغال شده است و در نتیجه منطبق است.



شکل ۱۴-۹: اشغال ترازهای لاندائو در میدانهای رو به افزایش پی‌درپی $B_۱ < B_۲ < B_۳$. اینجا μ_0 پتانسیل شیمیایی در غیاب میدان است. برچسب ترازها در زیرنویس شکل ۱۴-۸ توصیف شده است.

وابستگی حاصل در پتانسیل شیمیایی به میدان در شکل ۱۴-۱۰ نشان داده شده است که در آن هر گاه تعداد صحیحی از ترازهای لاندائو کاملاً پر شوند، افتهای ناپیوسته‌ای رخ می‌دهد. اگر n_A الکترون به ازای واحد سطح وجود داشته باشد، این پدیده وقتی اتفاق می‌افتد که n_A/N_L مساوی یک عدد صحیح i شود؛ بنابراین معادلهٔ (۱۴-۲۰) میدان B_i را که در آن دقیقاً i تراز لاندائو پر هستند مشخص می‌کند.

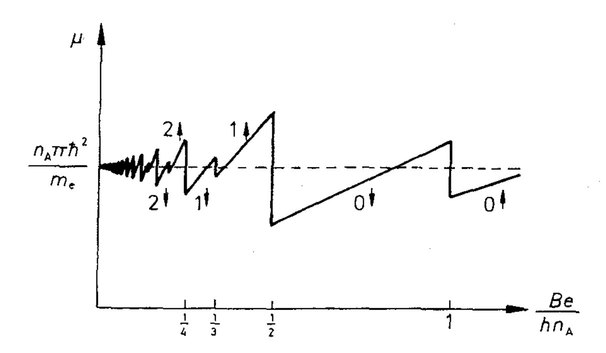
$$B_i = \frac{N_L\, h}{e} = \frac{n_A\, h}{i\, e} \qquad (۱۴\text{-}۲۱)$$

این نتیجه امکان می‌دهد که نشان دهیم پر شدن ترازهای لاندائو به اثر کوانتومی هال مربوط است. برای این منظور، با استفاده از دستاوردمان در مورد ذرات کلاسیکی (معادلهٔ (۱۴-۱۳))، مقاومت ویژهٔ عرضی را در میدانهای داده شده توسط معادلهٔ (۱۴-۲۱) محاسبه می‌کنیم

$$\rho_T = -\frac{B_i}{n_A\, e} = -\frac{h}{ie^۲} \qquad (۱۴\text{-}۲۲)$$

اینها دقیقاً مقادیر ρ_T در طول قسمتهای افقی پله‌های شکل ۱۴-۷ هستند. اینکه رسانندگی طولی σ_L و در نتیجه مقاومت ویژهٔ طولی ρ_L، هر گاه که تعداد صحیحی از ترازهای لاندائو کاملاً پراند، باید صفر شوند غیر منتظره نیست زیرا، همان گونه که قبلاً در بخش ۴-۲ دیده‌ایم، رسانش الکتریکی به وجود حالتهای اشغال نشدهٔ الکترونی در پتانسیل شیمیایی نیاز دارد.

برای فهم کامل اثر کوانتومی هال لازم است توضیح دهیم که چرا مقدار کوانتیدهٔ $h/ie^۲$ برای



شکل ۱۴-۱۰ : پتانسیل شیمیایی به صورت تابعی از میدان مغناطیسی برای گاز الکترونی دو بعدی. افتهای عمودی وقتی رخ می‌دهند که پتانسیل شیمیایی از یک تراز لاندائو به تراز دیگر منتقل شود. برچسبها ترازهای لاندائوای را مشخص می‌کنند که پتانسیل شیمیایی در آن قرار دارد؛ زیرنویس شکل ۱۴-۸ این برچسب‌ها را توضیح می‌دهد.

ρ_T و صفر شدن ρ_L نه فقط در میدان B_i بنابر پیش‌بینی معادلهٔ (۱۴-۲۱) بلکه در گستره‌ای از میدانها حول B_i اتفاق می‌افتد. توضیح کامل ورای چارچوب این کتاب است اما خلاصهٔ آن را برای خواننده ارائه می‌کنیم.

تنها در یک گاز الکترونی آزاد دو بعدی کامل می‌توان انتظار ترازهای به طور ایده‌آل تیز لاندائو را مطابق معادلهٔ (۱۴-۱۸) و شکل ۱۴-۸ داشت. در عمل این ترازها توسط ناکاملیهای ماده پهن می‌شوند تا منحنی چگالی حالتهایی نظیر شکل ۱۴-۱۱ را به وجود آورند. هنوز هم ستیغ چگالی حالتها در انرژیهای داده شده در معادلهٔ (۱۴-۱۸) ظاهر می‌شوند ولی ستغیهای مجاور به مقدار قابل توجهی هم‌پوشانی دارند. اعتقاد بر آن است که حالتهای نزدیک ستیغها در سرتاسر بلور گسترده‌اند و در نتیجه الکترونهای متحرک را نمایش می‌دهند. حال آنکه حالتهای موجود در گودیها مربوط به الکترونهای نارسانی جایگزیده‌اند[1].

با افزایش میدان مغناطیسی، فاصلهٔ بین ستیغها و اندازهٔ آنها درست مانند مورد ایده‌آل افزایش می‌یابد. پتانسیل شیمیایی باز هم نوسانی است اما دیگر افتهای ناپیوستهٔ شکل ۱۴-۱۰

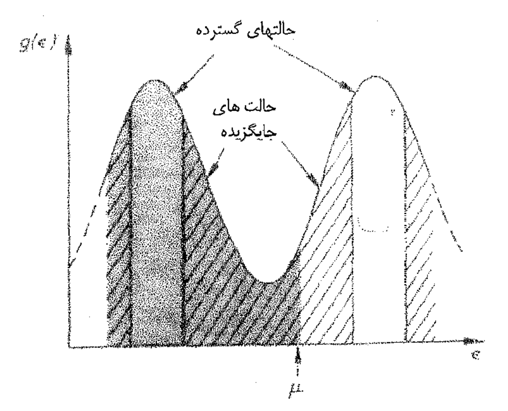
۱- توضیحی در مورد اینکه چرا چگالی کم الکترونی به عدم تحرک منجر می‌شود در بخش ۱۳-۵-۶ ارائه شده است. اینکه چرا چگالی کم حالتها نیز باید چنین اثری داشته باشد را می‌توان با تصور کردن تمام حالتها اساساً به صورت جایگزیده ولی با این امکان که رسانش در اثر جهش یک الکترون از حالتی جایگزیده به حالت دیگر حاصل شود درک کرد. چنین فرایندی تنها در صورتی رخ می‌دهد که در مجاورت این حالت به تعداد کافی حالتهای با انرژی تقریباً یکسان موجود باشند و بنابراین تنها اگر چگالی حالتها در آن انرژی از یک تعداد بحرانی بیشتر باشد این فرایند اتفاق می‌افتد.

را ندارد. در عوض وقتی پتانسیل شیمیایی نزدیک انرژی یکی از ستیغهای منحنی چگالی حالتها باشد به آرامی افزایش می‌یابد و وقتی نزدیک یک گودی در منحنی چگالی حالتها قرار گیرد به آهستگی کاهش می‌یابد. وقتی پتانسیل شیمیایی در ناحیه‌ای با حالتهای جایگزیده مانند شکل ۱۴-۱۱ قرار می‌گیرد انتظار می‌رود که دستگاه دو بعدی الکترونی به صورت یک عایق رفتار کند و بنابراین می‌توان توضیح داد که چرا رسانندگی الکتریکی طولی σ_L در گستره‌ای از میدان مغناطیسی صفر می‌شود. توضیح اینکه چرا، در گستره‌ای از میدان مغناطیسی که به ازای آن پتانسیل شیمیایی در ناحیهٔ حالتهای جایگزیده قرار دارد، مقاومت ویژهٔ عرضی ρ_T ثابت می‌ماند مشکل‌تر است. چنین است که یک تراز لاندائو چنان رفتار می‌کند که گویی هر گاه که حالتهای **متحرک** درون آن کاملاً اشغال شده باشد، این تراز **دقیقاً** پر است. این نکته قابل توجه است که در عمل نه تنها این وضعیت رخ می‌دهد بلکه مقدار ρ_T نیز از رابطهٔ (۱۴-۲۲) برحسب ثابتهای بنیادی به دقت تعیین می‌شود. کوانتش اثر هال در یک دستگاه الکترونی دو بعدی به چیزی بنیادی‌ تراز کوانتش عنصر بار e بستگی ندارد!

درست همان گونه که اثر جوزفسون در ابررسانایی روشی عالی برای تعریف یک استاندارد ولتاژ فراهم می‌آورد (بخش ۱۰-۵-۴)، اثر کوانتومی هال در دستگاه الکترونی دو بعدی نیز می‌تواند برای تعریف واحد مقاومت به کار رود. مقدار ρ_T برروی یکی از پله‌ها به دقتی بیش از وقتی که h/e^2 با آن تعیین شده است ثابت است، بنابراین برای این منظور لازم است مقداری برای h/e^2 تعریف کنیم. البته مقداری که انتخاب می‌شود با بهترین مقدار شناخته شده برای h/e^2 سازگار است.

۱۴-۴ قطعات تشدید تونل‌زنی

در بیشتر قطعات نیمرسانا که در فصل ۶ بحث شد[1] ، دینامیک حاملها با تقریب خوبی توسط معادلات کلاسیکی حرکت نظیر معادلات (۵-۳۷) توصیف می‌شود؛ این معادلات مسیر



شکل ۱۴-۱۱ : چگالی حالتهای مربوط به دو تراز لاندائوی مجاور که توسط ناکاملبهای درون لایه پهن شده‌اند. نواحی جایگزیده و گسترده مشخص شده‌اند. هاشورها مشخص می‌کنند که چه حالتهایی اشغال شده‌اند.

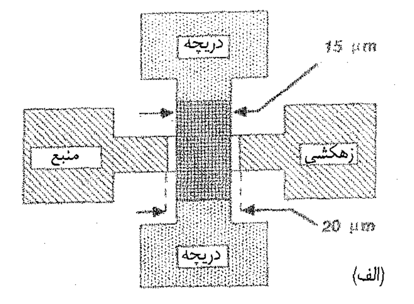
۱- دیود تونلی یک استثناء است.

بسته‌های موج نمایش دهنده ذرات را به طور صحیح پیش‌بینی می‌کنند و طبیعت موجی ذرات هیچ نقش اساسی در رفتار آنها ندارد. تداوم تحقیق برای قطعات نیمرسانای سریعتر و کوچکتر قطعاً منجر به استفاده از ساختارهایی می‌شود که در آنها آثار کوانتومی ضروری و اجتناب ناپذیر است. آثار کوانتومی در صورتی مهم می‌شوند که یک حامل در راستای حرکتش با ساختارهایی که از نظر اندازه با طول موج دوبروی آن قابل مقایسه‌اند روبرو شود. برای الکترونی با انرژی $k_B T$ در $T = ۳۰۰K$ این طول موج برابر است با

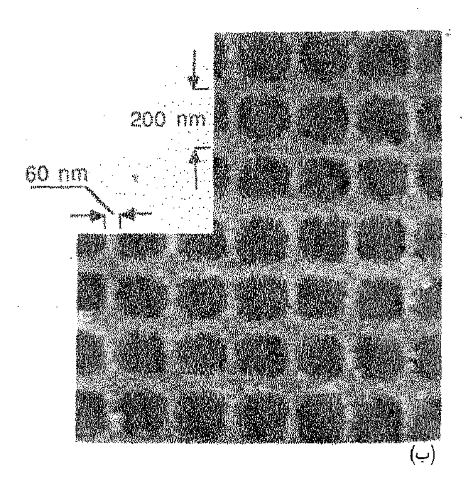
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{m}\left(\frac{m}{k_B T}\right)^{1/2} = \frac{h}{(m k_B T)^{1/2}} \approx ۱۰ nm \qquad (۲۳\text{-}۱۴)$$

برای شارش حاملها به **موازات** یک لایهٔ دو بعدی، مانند تراتریستور با الکترون با تحرک زیاد در شکل ۶-۱۴، هندسهٔ الکترود دریچه ممکن است به‌گونه‌ای ساخته شود که حاملها تحت یک پتانسیل الکتروستاتیکی که در مقیاس طولی برابر با طول موج دوبروی متغیر است قرار گیرند. این گونه ساختار دریچه در شکل ۱۴-۱۲ نشان داده شده است و می‌توان آن را با فرایندی مشابه آنکه برای ایجاد نقش الکترود در شکل ۶-۱۲ توصیف شد تهیه کرد. ولی تولید پوششی که تعریف چنین ساختارهای کوچکی را میسر کند با لیتوگرافی اپتیکی عملی نیست، زیرا آثار بنیادی پراش مانع کانونی شدن نور در مقیاس طولی از مرتبهٔ نانومتر می‌شود. برای دستیابی به جداکنندگی لازم، به تابش با طول موج بسیار کوتاه نیاز است؛ لیتوگرافی با باریکهٔ الکترونی کانونی شده و یا با باریکهٔ کانونی شده هر دو به طور موفقیت‌آمیز برای آماده‌سازی پوشش‌هایی با جداسازی از این مرتبه به‌کار رفته‌اند. وقتی چنین مقیاسهای طولی کوچکی درکار است مانند شکل ۶-۱۲، نوردهی ماده مقاوم در مقابل نور از طریق پوشش معمولاً با پرتوهای X انجام می‌شود. آن آثار کوانتومی‌ای که در فهم رفتار قطعه در شکل ۱۴-۱۲ مهم هستند، با مشاهده اینکه شبکه برای الکترونهایی که از درون لایه حرکت می‌کنند به عنوان یک شبکهٔ پراش رفتار می‌کند، قابل نمایش است.

برای حاملهایی که **عمود** بر لایه‌های دو بعدی در یک ساختار پیوندگاه ناهمجنس حرکت می‌کنند، ضخامت لایه می‌تواند با طول موج حاملها قابل مقایسه باشد؛ **قطعات تشدید تونل‌زنی** از این امکان بهره می‌برند. شکل ۱۴-۱۳ (الف) نوار رسانش را در یک دیود تشدید تونل زنی نشان می‌دهد. دو لایهٔ بسیار نازک $Ga\,Al\,As$ سدهای پتانسیل را ایجاد می‌کنند. که همان‌گونه که نشان داده شده است، به حالتهای مقید درون لایهٔ مرکزی $Ga\,As$ منجر می‌شوند (به شکل ۱۴-۴ رجوع کنید). نواحی $Ga\,As$ با آلایش سنگین در قسمت خارجی ساختار لایه‌ای اتصالهایی هستند که از طریق آنها حاملها می‌توانند تزریق و خارج شوند. یک الکترون برای عبور از یک ناحیهٔ اتصال به ناحیهٔ دیگر باید از طریق دو سد پتانسیل متوالی تونل بزنند. احتمال این کار معمولاً کم است



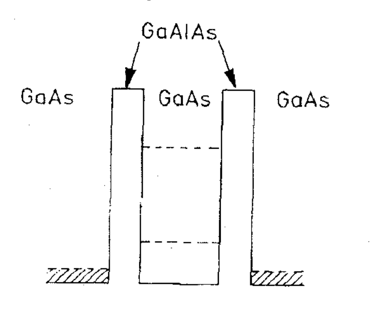
شکل ۱۴-۱۲ : (الف) ترانزیستور با الکترون با تحرک زیاد که در آن الکترود دریچه از آلیاژ Ti/Au ساخته شده است و دارای یک ساختار شبکه‌ای است.



(ب) تصویر میکروسکوپ روبشی تونل‌زنی از ساختار دریچه (با اجازه از *Ismail et. al. Appl. Phys. Lett.* **54**, *460 (1989)* اقتباس شده است)

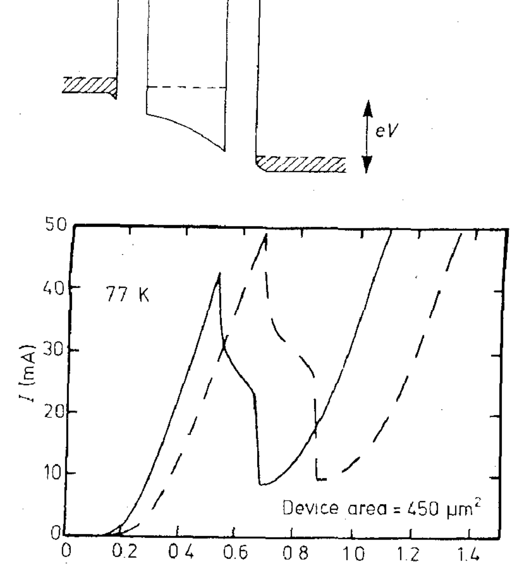
و جریان حاصل از بایاس اعمالی درون قطعه کوچک است. ولی همان‌گونه که در شکل ۱۴-۱۳ (ب) مشخص شده است بایاس اعمالی موقعیت انرژی حالت مقید را نسبت به انرژی الکترونهای تونل‌زننده تغییر می‌دهد؛ وضعیت نشان داده شده مربوط به موقعیتی است که در آن انرژی الکترونهای تونل‌زننده مساوی انرژی پایین‌ترین تراز مقید است. بنابراین طول موج الکترونها دو برابر ضخامت لایه‌است و این به پدیدهٔ تشدید تونل‌زنی منجر می‌شود. احتمال آنکه یک الکترون از یک اتصال به اتصال دیگر تونل بزند در این بایاس به واحد می‌رسد و ستیغ حاصل در جریان در شکل ۱۴-۱۳ (ج) نشان داده شده است.

ساده‌ترین روش برای درک تشدید تونل‌زنی آن است که از تشابه با اتالون فابری - پروای که در تداخل سنجی اپتیکی به کار می‌رود، استفاده کنیم (اسمیت و تامسون[5]، فصل ۱۳) دو سد پتانسیل همچون آینه‌های با باز تابندگی بالا و عبور کم اتانون عمل می‌کنند و لایه $GaAs$ مرکزی گاف بین آنهاست. برای فرود عمودی، اتانون فابری - پرو، تنها وقتی که گاف مضرب صحیحی از نصف طول موج است نور را قویاً عبور می‌دهد. در نتیجه دامنهٔ نور در گاف با تداخل سازندهٔ پرتوهای چند بار بازتاب یافته بزرگ می‌شود. در دیود تشدید تونل‌زنی انباشت متناظر



(الف) لبهٔ نوار رسانش در ساختار دیود با تشدید تونل‌زنی. انرژی حالتهای مقید در چاه پتانسیل $GaAs$ مشخص شده است.

(ب) تأثیر بایاس اعمالی بر نمودار انرژی



(ج) مشخصهٔ جریان – ولتاژ در یک دیود با تشدید تونل‌زنی. خط‌چین نشانگر رفتار برای بایاس اعمالی در جهت مخالف است. (با اجازه از مرجع زیر اقتباس شده است

Huang et. al., Appl. Phys. Lett 51, 121 (1987))

شکل ۱۴-۱۳

بارالکترون در تراز مقید، انرژی تراز را افزایش می‌دهد، با این نتیجه که، با افزایش بایاس، در گسترهٔ وسیعتری از بایاس در مقایسه با مورد بدون انباشت تشدیدی بار، انرژی تراز با انرژی الکترون فرودی برابر می‌ماند. ناحیهٔ مقاومت منفی در مشخصهٔ جریان – ولتاژ در شکل ۱۴-۱۳ (ج) کاربردی برای دیود تشدید تونل‌زنی در مدارهای نوسانگر فراهم می‌آورد. با استفاده از دیودهای تشدید تونل‌زنی قطعاتی ساخته شده‌اند که در بسامدهای از مرتبهٔ $10^{12}\ Hz$ عمل می‌کنند.

می‌توان یک تراتریستور تشدید تونل‌زنی نیز ساخت که در آن مکان تراز مقید در چاه پتانسیل تحت تأثیر یک الکترود سوم (کنترل) باشد. یک امکان آن است که ساختار تشدید تونل‌زنی شکل ۱۴-۱۳ (الف) را در پیوندگاه پایه -گسیلندهٔ یک تراتریستور دو قطبی به کار گیریم به گونه‌ای که بایابس گسیلنده - پایه موقعیت تراز را تعیین کند. در نتیجه ستیغهای جریان جمع‌کننده مانند شکل ۱۴-۱۳ (ج) به صورت تابعی از ولتاژ پایه -گسیلنده پدیدار می‌شوند.

شایسته است که این کتاب با این نگاه اجمالی بر یک زمینهٔ رشد بالقوه در فیزیک حالت جامد خاتمه یابد. امکان استفاده از قطعات حالت جامد در اپتیک فیزیکی (در مقابل اپتیک هندسی) با امواج الکترونی درست یکی از زمینه‌هایی است که در آن فیزیک حالت جامد کماکان تحقیقات بنیادی فیزیک را با پیشرفت فن‌آوری ترکیب می‌کند.

مسایل ۱۴

۱-۱۴ انرژیهای فوتون که برای آنها شروع جذب برای لایه‌های $GaAs$ به ضخامت ۱۴۰ Å و ۲۱۰ Å در شکل ۱۴-۵ را انتظار دارید محاسبه کنید و جواب خود را با مقادیر مشاهده شده مقایسه کنید. ساده‌ترین رهیافت آن است که فرض کنید که انرژیهای حالت مقید تقریباً همان انرژیهای مربوط به چاههای پتانسیل مربعی نامحدودند. گاف انرژی $GaAs$ را برابر ۱/۵۱۹ eV و جرم‌های مؤثر الکترونها و حفره‌ها را به ترتیب ۰/۰۶۶۵m و ۰/۴۵ m بگیرید، که در آن m جرم الکترون برهنه است.

برای به دست‌آوردن مقادیر دقیق‌تر برای انرژیهای فوتون، لازم است که عمق متناهی چاههای پتانسیل منظور شود. اگر مایلید این کار را انجام دهید باید بدانید که عمق چاهها در لبه‌های نوارهای رسانش و ظرفیت به ترتیب برابر ۰/۲۲۰eV و ۰/۰۲۸eV است.

۲-۱۴ برای محاسبهٔ انرژی بستگی یک اکسیتیون در $Ga\ As$ حجیم نظریهٔ بور را به کار برید. جرمهای مؤثر مسئلهٔ قبل را به کار برید و ثابت دی‌الکتریک را ۱۳ اختیار کنید.

۳-۱۴ نشان دهید که مقادیر ρ_T روی پله‌های شکل ۱۴-۷ با معادلهٔ (۱۴-۱۴) سازگارند. با استفاده از داده‌های میدان پایین در این شکل، مقادیر مربوط به تعداد الکترونها به ازای واحد سطح و زمان پراکندگی الکترونها را به دست آورید (فرض کنید $m_e = ۰/۰۷m$). انرژی فرمی گاز الکترونی دو بعدی را محاسبه کنید. میدانی که در آن یک الکترون بین برخوردها یک مدار سیکلوترونی را کامل می‌کند برآورد کنید و در مورد پاسخ اظهارنظر کنید. دمای بیشینه‌ای را برآورد کنید که در آن انتظار دارید ساختار پله گونه در ρ_T را مشاهده کنید.

پیوست (الف)

دامنه‌های احتمال جفت شده

در این بخش معادلات دامنهٔ احتمال جفت شدهٔ (۴-۹) را با استفاده از معادلهٔ شرودینگر

(الف-۱)
$$i\hbar\partial\psi/\partial t = H\Psi$$

به دست می‌آوریم، که در آن H عملگر هامیلتونی است. برای این کار، تابع موج $\psi(\mathbf{r}, t)$ را به صورت یک سری از مجموعهٔ توابع $\psi_l(\mathbf{r})$ (که مطابق معادلهٔ (۴-۷) می‌توانند ویژه توابع اتمی باشند) بیان می‌کنیم

(الف-۲)
$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_l a_l(t)\psi_l(\mathbf{r})$$

چنین بسطی همواره امکانپذیر است به شرطی که ψ_l **مجموعه‌ای کامل** از توابع بسازند. مثالی از یک مجموعهٔ کامل توابع سینوس و کسینوس هستند؛ در این حالت بسط (الف-۲) به سری فوریه، یا در حدی که در آن Ψ را نتوان به عنوان تابعی دوره‌ای از مکان تلقی کرد، به تبدیل فوریه موسوم است. ضرائب بسط a_l در معادلهٔ (الف-۲) تابع زمانند زیرا Ψ به زمان وابسته است. در اینجا، نگران این سؤال صوری که مجموعهٔ کامل چیست، نخواهیم بود، ولی فقط، برای رسیدن به معادلات (۴-۹) فرض خواهیم کرد که مجموعه‌ای از توابع ψ_l به نحوی در اختیار داریم که بسط (الف-۲) هم‌شدنی و هم یکتا باشد. بعداً در همین پیوست بحث خواهیم کرد که توابعی، که در عمل در این کتاب به کار برده‌ایم تا چه حد این شرط را برآورده می‌کنند.

اگر فرض کنیم که هم $\Psi(\mathbf{r},t)$ ها و هم $\psi_l(\mathbf{r})$ ها بهنجار هستند، احتمال یافتن دستگاه در

حالت ψ_n در زمان t همانا $|c_n(t)|^2$ است، که در آن دامنهٔ احتمال $c_n(t)$، با استفاده از معادلهٔ (الف-۲) به صورت زیر بیان می‌شود:

$$c_n(t) = \int \psi_n^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r} = \sum_l a_l(t) \int \psi_n^*(\mathbf{r})\psi_l(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \quad \text{(الف-۳)}$$

اگر توابع ψ_l علاوه بر بهنجار بودن متعامد هم باشند، انتگرال معادلهٔ (الف-۳) برای $m\neq n$ برابر صفر و برای $m=n$ برابر واحد است، در نتیجه $c_n(t) = a_n(t)$. می‌خواهیم توابع موج اتمی متمرکز در جایگاههای شبکه‌ای همجوار را به کار بریم، که برهم متعامد نیستند و از این رو استدلال را بدون فرض تعامد ادامه خواهیم داد. یک مثال مشابه هندسی می‌تواند به روشن شدن معادلهٔ (الف-۳) کمک کند. معادلهٔ (الف-۲) مشابه نوشتن یک بردار برحسب مؤلفه‌هایش در یک فضای بس بعدی است. در این مشابه‌سازی a_n ها متناظر با مؤلفه‌های بردار و c_n ها تصاویر بردار روی محورهای مختصات هستند؛ اینها فقط در صورتی با هم برابرند که محورهای مختصات متعامد (متقابلاً عمود بر هم) باشند.[1]

حال بسط (الف-۲) را در معادلهٔ شرودینگر (الف-۱) درج می‌کنیم تا به دست آوریم

$$i\hbar \sum_l \frac{da_l}{dt}\psi_l(\mathbf{r}) = \sum_l a_l H \psi_l(\mathbf{r}) \quad \text{(الف-۴)}$$

اگر معادله (الف-۴) را از سمت چپ در $\psi_n^*(\mathbf{r})$ ضرب کنیم و روی تمام فضا انتگرال بگیریم، با استفاده از معادلهٔ (الف-۳)، به عبارتی برای dc_n/dt می‌رسیم:

$$i\hbar\frac{dc_n}{dt} = i\hbar \sum_l \frac{da_l}{dt} \int \psi_n^*(\mathbf{r})\psi_l(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} =$$

$$= \sum_l a_l \int \psi_n^*(\mathbf{r})H\psi_l(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \sum_l a_l \int \psi_l(\mathbf{r})H\psi_n^*(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \quad \text{(الف-۵)}$$

در آخرین مرحله از محاسبات از خاصیت هرمیتی بودن عملگرها میلتونی استفاده شده است. این خاصیت آشکارا برای جملهٔ انرژی پتانسیل در H برقرار است؛ برای اینکه ببینیم آیا این خاصیت در مورد جملهٔ انرژی جنبشی $-\hbar^2\nabla^2/2m$ نیز درست است یا نه، توجه می‌کنیم که انتگرال‌گیریهای جزء به جزء پیاپی چنین به دست می‌دهد

$$\int \psi_1^* \nabla^2\psi_2 d^3\mathbf{r} = -\int (\nabla\psi_1^*).(\nabla\psi_2)\, d^3\mathbf{r} = \int (\nabla^2\psi_1^*)\psi_2 d^3_{\mathbf{r}}$$

۱- نگران نباشید که وقتی ψ_n ها متعامد نیستند، احتمال کل $\sum_n |C_n|^2 \neq 1$؛ دلیل آن است که امکانها در این شرایط متقابلاً طرد کننده یک دیگر نیستند.

تنها به این شرط که ψ_1 و ψ_2 و مشتقهای آنها در بی‌نهایت صفر شوند، در نتیجه انتگرالهای سطح صفر می‌شوند.

توجه کنید که $H\psi_n^*(\mathbf{r})$ تابع دیگری از مکان است و در نتیجه آن را نیز می‌توان به روشی مشابه معادله (الف-۲) بسط داد،

$$H\psi_n^*(\mathbf{r}) = \sum_m E_{nm}\,\psi_m^*(\mathbf{r}) \qquad \text{(الف-۶)}$$

تنها تفاوت آن است که ضرایب بسط E_{nm} مستقل از زمانند و این توابع را به جای مجموعهٔ $\psi_m(\mathbf{r})$، برحسب مجموعهٔ کاملی از توابع $\psi_m^*(\mathbf{r})$ بسط داده‌ایم. حال با درج بسط (الف-۶) در معادلهٔ (الف-۵) و استفاده از معادلهٔ (الف-۳)، داریم

$$i\hbar\frac{dc_n}{dt} = \sum_l\sum_m E_{nm}\,a_l\int\psi_l(\mathbf{r})\psi_m^*(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \sum_n E_{nm}\,c_m \qquad \text{(الف-۷)}$$

اینها همان معادلات (۴-۹) هستند. از مقایسهٔ معادلات (الف-۵) و (الف-۷) دیده می‌شود که ضرایب E_{nm} را می‌توان از حل مجموعهٔ معادلات همزمان زیر محاسبه کرد:

$$\sum_m E_{nm}\int\psi_l^*(\mathbf{r})\psi_l(\mathbf{r})\,d^3\mathbf{r} = \int\psi_n^*(\mathbf{r})H\psi_l(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \qquad \text{(الف-۸)}$$

در حالت خاصی که $\psi_l(\mathbf{r})$ همگی متقابلاً متعامدند، معادلهٔ (الف-۸) به صورت زیر در می‌آید

$$E_{nl} = \int\psi_n^*(\mathbf{r})H\psi_l(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = H_{nl} \qquad \text{(الف-۹)}$$

و لذا در این حالت E_{nl} ها آنهایی هستند که معمولاً **عناصر ماتریس** عملگر H نامیده می‌شوند. در حالت کلی، اگر نامتعامد بودن اندک باشد، E_{nl} ها بسیار نزدیک به عنصر ماتریس خواهند بود. فرمولبندی مکانیک کوانتمی به زبان دامنه‌های احتمال جفت شده، از طریق معادلات (الف-۷) و (الف-۹) توسط فایمن [۶] به عنوان اساس تلقی شد. فایمن کسی است که از این فرمولبندی استفاده کرد و معادلهٔ شرودنیگر را توجیه کرد، یعنی عکس آنچه که ما در این پیوست عرضه کرده‌ایم.

حال بررسی می‌کنیم که چگونه می‌توان به مجموعه‌ای کامل از توابع موج $\psi_n(\mathbf{r})$ دست یافت به نحوی که بتوان بسطهای (الف-۲) و (الف-۶) را انجام داد. براساس یک قضیهٔ کلی، همهٔ ویژه حالتهای انرژی، مقید و نامقید، برای الکترون واقع در میدان ناشی از یک تک یون مثبت، مجموعه‌ای کامل می‌سازد. ولی این یک مجموعهٔ کامل مفید نیست، زیرا برای توصیف

الکترونی، که در بخش دورافتاده‌ای از بلور مقید به یون دیگری است، جملات بسیار زیادی لازم است. می‌توانستیم سعی کنیم با این مشکل به این صورت برخورد کنیم که تمام توابع موج متمرکز روی هر یون در بلور را در نظر بگیریم؛ ولی این مجموعهٔ بزرگ شده آشکارا فرا کامل است؛ به این معنا که در این مجموعه برخی از توابع را می‌توان برحسب دیگر توابع بسط داد. این مطلب دارای پیامد ناگوار عدم یکتایی بسطهای (الف-۲) و (الف-۶) است.

در این کتاب مجموعهٔ محدودی از توابع موج را به کار می‌بریم که شامل پایین‌ترین حالت مقید اشغال نشدهٔ روی هر یون است. این مجموعه ناکامل است و لذا بسطهای (الف-۲) و (الف-۶) را فقط با دقتی محدود می‌توان انجام داد. ولی، این ساده‌سازی ما را قادر می‌سازد به طور کیفی، با حداقل محاسبه، نتایج درستی به دست آوریم. برای درک تقریب درگیر مسئله، کاربرد معادلهٔ (الف-۶) را در مسئلهٔ H_2^+، که در بخش ۴-۳-۲ به آن پرداختیم، بررسی می‌کنیم: هامیلتونی این دستگاه عبارت است از

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_1 + V_2 \qquad \text{(الف-۱۰)}$$

که در آن V_1 و V_2 به ترتیب، پتانسیلهای کولنی در مکان هسته‌ها، R_1 و R_2، هستند. اگر $\psi_1(\mathbf{r})$ حالت پایهٔ اتمی برای اتمی واقع در $\mathbf{R}_1$ باشد، آنگاه داریم

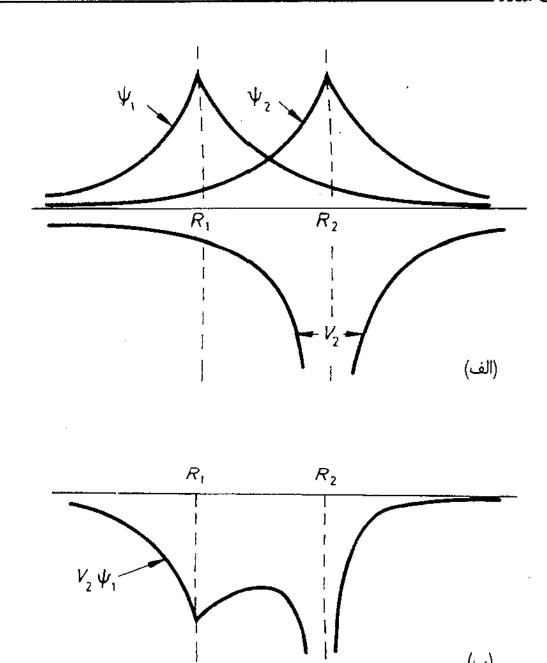
$$H\psi_1 = E_0\psi_1 + V_2\psi_1 \qquad \text{(الف-۱۱)}$$

که در آن E_0 انرژی حالت پایه است.

معادلات جفت شدهٔ (۴-۱۳) برای این مسئله را می‌توان به روش بالا با این شرط به دست آورد که $H\psi_1$ را بتوان به شکل معادلهٔ (الف-۶) بسط داد

$$H\psi_1 \approx B\psi_1 - A\psi_2 \qquad \text{(الف-۱۲)}$$

که در آن B و A ضرایبی هستند که در معادلات (۴-۱۳) ظاهر می‌شوند؛ توجه می‌کنیم که ψ_1 و ψ_2 در این مسئله حقیقی‌اند و لذا $\psi_1 = \psi_1^*$. مقایسهٔ معادلهٔ (الف-۱۱) با (الف-۱۲) نشان می‌دهد که اگر $V_2\psi_1$ را بتوان برحسب ψ_1 و ψ_2 بسط داد، بسط فوق امکان‌پذیر است. این توابع در شکل الف-۱ رسم شده‌اند؛ این شکل نشان می‌دهد که بسط فوق تقریباً امکانپذیر است، زیرا $V_2\psi_1$ ستیغهایی در مجاورت $\mathbf{R}_1$ و $\mathbf{R}_2$ دارد که به ترتیب مکان ستیغهای ψ_1 و ψ_2 هستند. واضح است که برازش کامل ستیغها ممکن نیست، زیرا $V_2\psi_1$ در $\mathbf{R}_2$ واگرا می‌شود، در حالی که ψ_2 در آن نقطه متناهی است. معادلات (الف-۸) پیشنهاد می‌کند که محک انتخاب مقادیر بهینه برای A و B آن است که مقادیر $\int\psi_1 H\psi_1 d^3\mathbf{r}$ و $\int\psi_2 H\psi_1 d^3\mathbf{r}$ باید برای نتیجهٔ دقیق (الف-۱۱)



شکل الف-۱ : (الف) توابع موج حالت پایه ψ_1 و ψ_2 و پتانسیل V_2 مربوط به اتمهای منزوی هیدروژن واقع در $\mathbf{R}_1$ و $\mathbf{R}_2$. (ب) تابع $V_2\psi_1$، که باید به صورت ترکیب خطی ψ_1 و ψ_2 [معادلهٔ (الف-۱۲)] نمایش داده شود.

و نتیجهٔ تقریبی (الف-۱۲) یکسان باشند.

با اندکی تفکر می‌توان نشان داد که وقتی پروتونها بسیار دور از هم هستند، داریم

$$A = E_0 + V_2(\mathbf{R}_1) = E_0 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R}$$

که در آن $R = |\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|$. جملهٔ آخر دافعهٔ بین هسته‌ای را دقیقاً حذف می‌کند و لذا شکافتگی اربیتالهای پیوندی و پاد پیوندی برای مقادیر بزرگ R فقط به ضریب B مربوط می‌شود. این مطلب توضیح می‌دهد که چرا این شکافتگی در شکل ۴-۷ (ب) متقارن است.

حقیقت به ندرت ناب است و هرگز ساده نیست.
(اسکاروایلد)

پیوست (ب)
میدانهای الکتریکی و مغناطیسی درون مواد[1]

ابتدا مواد مغناطیسی را بررسی می‌کنیم و سعی خواهیم کرد در رابطهٔ بین کمیتهای زیر را روشن کنیم :

(۱) میدان مغناطیسی موضعی $\mathbf{B}_L$، که انرژی گشتاور دو قطبی اتمی را از طریق معادلهٔ (۷-۸) تعیین می‌کند،

(۲) میدان $\mathbf{B}_{mac}$ درون ماده که به طور ماکروسکوپی متوسط گیری می‌شود؛ و

(۳) میدان مغناطیسی اعمال شدهٔ B_e.

برای سادگی فقط شکلهایی از نمونه را بررسی می‌کنیم که برای آنها مغناطش $\mathbf{M}$ در فضا یکنواخت است.

به دلیل سهم گشتاورهای دو قطبی اتمی، میدان مغناطیسی میکروسکوپی واقعی، $\mathbf{B}_{mic}$، درون بلور در مقیاس طول اتمی سریعاً تغییر می‌کند. این میدان در معادلات ماکسول نیز صدق می‌کند.

$$div\ \mathbf{B}_{mic} = 0 \qquad \text{و} \qquad curl\ \mathbf{B}_{mic} = \mu_0\, \mathbf{j}_{mic} \tag{ب-۱}$$

که در آن J_{mic} چگالی جریان میکروسکوپی **کل** است ؛ سهم دو قطبیهای اتمی در $\mathbf{J}_{\mathbf{mic}}$ منبع تغییرات سریع $\mathbf{B}_{mic}$ است : میدان $\mathbf{B}_{mac}$ متوسط $\mathbf{B}_{mic}$ روی ناحیه‌ای است که اتمهای بسیار دربردارد. با استفاده از معادلات (ب-۱)، میدان $\mathbf{B}_{mac}$ در معادلات زیر صدق می‌کند:

۱- برای بحث مفصل‌تر، کتاب گرانت و فیلیپس [۳] را ببینید.

$$div\ \mathbf{B}_{mac} = 0 \quad , \quad curl\ \mathbf{B}_{mac} = \mu_0 \mathbf{j}_{ave} \tag{ب-۲}$$

که در آن J_{ave} متوسط J_{mic} است. میدان ماکروسکوپی $\mathbf{H}$، که در تعریف پذیرفتاری χ به کار گرفته می‌شود، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mathbf{B}_{mac} = \mu_0 (H_{mac} + \mathbf{M}) \tag{ب-۳}$$

دو قطبیهای اتمی رفتاری شبیه حلقه‌های کوچک جریان دارند (شکل ۷-۱) و نتیجه می‌شود که اگر مغناطش یکنواخت باشد، $\mathbf{J}_{ave}$، جز در سطح نمونه که در آنجا جریانی به ازای واحد طول برابر با ناپیوستگی در مؤلفهٔ M موازی سطح وجود دارد، صفر می‌شود (فصل ۵ کتاب گرانت و فیلیپس[۳] را ببینید). از این رو میدان $\mathbf{B}_{mac}$ را می‌توان به این صورت نوشت

$$\mathbf{B}_{mac} = \mathbf{B}_{\mathbf{e}} + \mathbf{B}_1 \tag{ب-۴}$$

که در آن $\mathbf{B}_1$ سهم ناشی از این جریان سطحی است.

حال $\mathbf{B}_{mac}$ و $\mathbf{H}_{mac}$ را برای سه هندسهٔ سادهٔ مهم، که در شکل ب-۱ ترسیم شده‌اند، محاسبه می‌کنیم.

استوانهٔ طویل موازی با میدان اعمال شده

$\mathbf{B}_1$ میدان درون یک سیملولهٔ دراز است که جریان $\mathbf{M}$ به ازای واحد طول را در جهت نشان داده شده در شکل ب-۱ (الف) حمل می‌کند. بنابراین

$$\mathbf{B}_1 = \mu_0 \mathbf{M} \tag{ب-۵}$$

و

$$\mathbf{B}_{mac} = \mathbf{B}_{\mathbf{e}} + \mu_0 \mathbf{M} \tag{ب-۶}$$

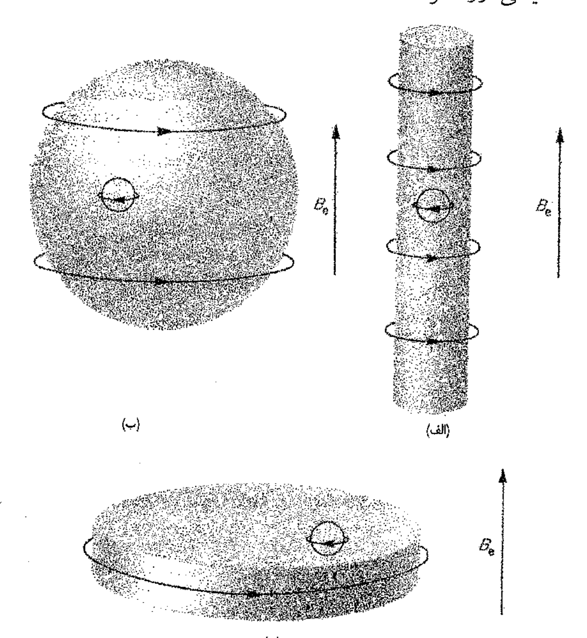
از مقایسه معادلات (ب-۳) و (ب-۶) دیده می‌شود که برای این هندسه، داریم

$$\mu_0\ \mathbf{H}_{\mathbf{mac}} = \mathbf{B}_e \tag{ب-۷}$$

قرص نازک عمود بر میدان اعمال شده

میدان در مرکز حلقهٔ جریان نشان داده شده در شکل ب-۱ (ج) به طور معکوس با شعاع متناسب است. جریان گذرنده از اطراف حلقه برابر $\mathbf{M} \times$ (ضخامت قرص) است. بنابراین برای قرص بسیار نازک می‌توان نوشت

$$\mathbf{B}_1 = 0 \tag{ب-۸}$$



شکل ب-۱ : توزیع جریان هم ارز مغناطش یکنواخت در شکلهای گوناگون نمونه برای جهت میدان نشان داده شده. جریانهای روی سطح خارجی، میدان $\mathbf{B}_1$ را معین می‌کنند [معادلهٔ (ب-۴)]. سطوح کروی کوچک نواحی‌ای هستند که درون آنها سهم $\mathbf{B}_3(0)$ ی [معادلهٔ (ب-۱۵)] دو قطبیهای اتمی در میدان $\mathbf{B}_L$ از یک دیدگاه میکروسکوپی بررسی می‌شود.

و لذا

$$\mathbf{B}_{mac} = \mathbf{B}_e \tag{ب-۹}$$

و

$$\mu \mathbf{H}_{mac} = \mathbf{B}_e - \mu_0 \mathbf{M} \tag{ب-۱۰}$$

کره

میدان $\mathbf{B}_1$ را در مرکز کره محاسبه می‌کنیم؛ در واقع در ناحیهٔ درون کره میدان یکنواخت است، هر چند این مطلب را اثبات نخواهیم کرد. $\mathbf{M}$ را در راستای محور z در شکل ب-۲ می‌گیریم و عنصری از سطح بین θ و $\theta + d\theta$، راکه در شکل نشان داده شده است در نظر می‌گیریم. ناپیوستگی در مؤلفه موازی $\mathbf{M}$ همانا $M \sin\theta$ است و لذا جریان گذرنده در عنصر دایره‌ای برابر $M(\sin\theta)Rd\theta$ است. با استفاده از قانون بیو- ساوار، میدان ناشی از طول کوتاه dl از عنصر عبارت است از

$$dB = \frac{\mu_c}{4\pi} \frac{M(\sin\theta)r\,d\theta}{R^2} dl$$

جهت این میدان در شکل ب-۲ نشان داده شده است. وقتی سهمهای ناشی از تمام عنصر دایره‌ای را برهم بیفزاییم، مؤلفه‌های عمود بر محور z یکدیگر را حذف می‌کنند و میدانی در راستای محور z و به صورت زیر به وجود خواهد آمد:

$$\frac{\mu_0}{4\pi}\,\frac{\mathbf{M}\,(sin^2\theta)R\,d\theta}{R^2}\;2\pi R\,sin\,\theta=\frac{1}{2}\,\mu_0\mathbf{M}\;\;sin^3\theta d\theta$$

انتگرالگیری از این رابطه روی کره میدان کل زیر را به دست می‌دهد:

$$\mathbf{B}_1=\int_0^{\pi}\frac{1}{2}\mu_0\mathbf{M}\,sin^3\theta d\theta=\int_1^{-1}-\frac{1}{2}\mu_0\mathbf{M}\,(1-c^2)\,dc=\frac{1}{2}\mu_0\mathbf{M}\,[c-\frac{c^3}{3}]_{-1}^{1} \quad \text{(ب-۱۱)}$$

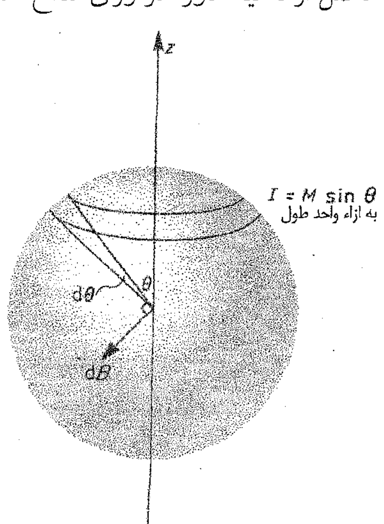
که در آن از جایگزینی $c=cos\,\theta$ استفاده کرده‌ایم. بنابراین در مورد یک کره، داریم

$$\mathbf{B}_{mac}=\mathbf{B}_{\mathbf{e}}+\frac{2}{3}\mu_0\,\mathbf{M} \quad \text{(ب-۱۲)}$$

و

$$\mu_0\mathbf{H}_{mac}=\mathbf{B}_e\;-\frac{1}{3}\mu_0\,\mathbf{M} \quad \text{(ب-۱۳)}$$

برای محاسبهٔ $\mathbf{B}_L$، یعنی مقدار $\mathbf{B}_{mic}$ در یکی از دوقطبی‌های اتمی، مبداء مختصات را در مرز اتم اختیار می‌کنیم. اثر اتمهای دور روی $\mathbf{B}_L$ فقط به مغناطش متوسط بستگی دارد و تابع ترتیب آن اتمها نیست. این امر حکایت از آن دارد که تقسیم نمونه به دو قسمت از مزیت برخوردار خواهد بود. اثر ناحیهٔ "نزدیک"، تا شعاع r، را به کمک توزیع میکروسکوپی تک‌تک دو قطبیهای اتمی محاسبه می‌کنیم؛ شعاع r در مقایسهٔ با ابعاد اتمی بزرگ، ولی در مقایسهٔ با اندازه نمونه کوچک، انتخاب می‌شود. سهم $\mathbf{B}_L$ حاصل از ناحیهٔ "دور" در ورای شعاع r، را به



شکل ب-۲ : محاسبهٔ میدان در مرکز یک ورقهٔ جریان کروی

کمک مغناطش $\mathbf{M}$ آن ناحیه محاسبه می‌کنیم. سطوح کروی کوچک که نواحی نزدیک و دور را از هم جدا می‌کنند، برای سه نمونه با شکلهای متفاوت در شکل ب -۱ نشان داده شده‌اند.

میدان در مکان $\mathbf{r}$ نسبت به مبداء مختصات را می‌توان به این صورت نوشت

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}_e + \mathbf{B}_1 + \mathbf{B}_2 + \mathbf{B}_3(\mathbf{r}) + \mathbf{B}_4(\mathbf{r}) \tag{ب-۱۴}$$

که در آن $\mathbf{B}_1$ سهم حاصل از جریان مغناطش روی سطح خارجی نمونه است، که در بالا محاسبه شد؛ $\mathbf{B}_2$ سهم ناشی از جریان مغناطش در سوی مخالف روی مرز داخلی ناحیه "دور" است؛ $\mathbf{B}_3$ میدان حاصل از اتمهای درون ناحیهٔ نزدیک به استثنای اتم واقع در مبدا، است؛ و $\mathbf{B}_4$ سهم حاصل از اتم واقع در مبداء است.

اثر $\mathbf{B}_4$ روی اتم واقع در مبداء قبلاً با وارد کردن جملاتی نظیر برهم کنش اسپین - مدار در انرژی اتم، منظور شده است؛ این همان برهم کنشی است که مسئول قاعدهٔ سوم هوند است. از این رو به هنگام محاسبهٔ $\mathbf{B}_L$ باید $\mathbf{B}_4$ را حذف کنیم. معمولاً فرض می‌شود که مقدار مناسب میدان برای درج درمعادلهٔ (۷-۸)، میدان در هسته اتم[1] است و بنابراین داریم

$$\mathbf{B}_L = \mathbf{B}_e + \mathbf{B}_1 + \mathbf{B}_2 + \mathbf{B}_3(0) \tag{ب-۱۵}$$

قبلاً $\mathbf{B}_1$ را برای نمونه‌های شکل ب-۱ محاسبه کرده‌ایم. از محاسبهٔ مربوط به میدان ناشی از یک ورقهٔ جریان کروی [معادلهٔ (ب-۱۲)] دیده می‌شود که

$$\mathbf{B}_2 = -\frac{2}{3}\mu_0 \mathbf{M} \tag{ب-۱۶}$$

در حال کلی، $\mathbf{B}_3(0)$، به ترتیب دو قطبیهای اتمی درون کره بستگی دارد و باید صریحاً محاسبه شود. دلیلی خاص برای به‌کارگیری مرزکروی جهت جداسازی نواحی نزدیک و دور آن است که در این حالت $\mathbf{B}_3(0)$ برای دو ترتیب مهم صفر می‌شود: (۱) ترتیب کاتوره‌ای (مثل ترتیب درون گاز)؛ (۲) دو قطبیهای ناهم بسته که با تقارن مکعبی حول نقطهٔ تحت بررسی مرتب شده‌اند (نظیر ترتیب دوقطبیها در بسیاری از نمکهای پارامغناطیسی). این نتیجه را اثبات

۱- برای درج میدانی بهتر می‌توانستیم میدان مغناطیسی را به صورت یک سری تیلور حول مکان هسته بسط دهیم. در آن صورت معادله، (۷-۸) با جملهٔ با مرتبهٔ برتر بسط متناظر می‌شود. جملهٔ بعدی مبین جفتیدگی بین شیب میدان مغناطیسی و گشتاور چهار قطبی *مغناطیسی* اتم است؛ پایستگی پارتیه حاکی از آن است که گشتاور چهار قطبی صفر می‌شود، در نتیجه این جمله احتمالاً کوچک است. جملهٔ بعدی جفتیدگی شیبهای مرتبهٔ دوم میدان با گشتاور هشت قطبی مغناطیسی اتم است.

نخواهیم کرد، ولی خواننده می‌تواند خود را در بارهٔ اعتبار آن، برای حالت کاتوره‌ای، به کمک انتگرالگیری از سهمهای حاصل از دوقطبیهای موجود در پوسته کروی، متقاعد سازد. بنابراین در حالت $\mathbf{B}_3(0) = 0$، با استفاده از معادلهٔ (ب-۱۵) داریم :

برای استوانهٔ طویل موازی میدان اعمال شده

$$\mathbf{B}_L = \mathbf{B}_e + \mu_0 \mathbf{M} - \frac{2}{3}\mu_0 \mathbf{M} + 0 = \mathbf{B}_e + \frac{1}{3}\mu_0 \mathbf{M} \qquad \text{(ب-۱۷)}$$

برای قرص نازک عمود بر میدان اعمال شده

$$\mathbf{B}_L = \mathbf{B}_e + 0 - \frac{2}{3}\mu_0 \mathbf{M} + 0 = \mathbf{B}_e - \frac{2}{3}\mu_0 \mathbf{M} \qquad \text{(ب-۱۸)}$$

برای کره

$$\mathbf{B}_L = \mathbf{B}_e + \frac{2}{3}\mu_0 \mathbf{M} - \frac{2}{3}\mu_0 \mathbf{M} + 0 = \mathbf{B}_e \qquad \text{(ب-۱۹)}$$

توجه کنید که روابط

$$\mathbf{B}_L = \mathbf{B}_{mac} - \frac{2}{3}\mu_0 \mathbf{M} = \mu_0 \mathbf{H}_{mac} + \frac{1}{3}\mu_0 \mathbf{M} \qquad \text{(ب-۲۰)}$$

در مورد هر نمونه‌ای با هر شکل برقراراند، به شرط آنکه $\mathbf{B}_3(0) = 0$. اگر $\mathbf{B}_3(0)$ غیر صفر باشد. در آن صورت باید آن را به معادلات (ب-۱۷) تا (ب-۲۰) اضافه کرد. توجه کنید که معادلهٔ (۸-۴۳) از کاربرد معادلهٔ (ب-۱۸) در مورد مؤلفهٔ مغناطش عمود بر یک ورقهٔ فلزی و از کاربرد معادلهٔ (ب-۱۷) در مورد مؤلفهٔ موازی آن ورقه ناشی می‌شود.

حال توجه خود را به میدان الکتریکی موجود در مواد معطوف می‌کنیم. رابطهٔ لورنتس [معادلهٔ (۹-۵)] بین میدان الکتریکی $\mathbf{E}_L$ روی یک اتم و میدان الکتریکی ماکروسکوپی $\mathbf{E}_{mac}$ درون ماده را تثبیت می‌کنیم. با استفاده از شباهت این مسئله با مورد مغناطیسی بسیاری از جزئیات مربوط را حذف می‌کنیم. فقط نمونه‌هایی را بررسی می‌کنیم که برای آنها قطبش $\mathbf{P}$ در فضا یکنواخت است. میدان الکتریکی میکروسکوپی، $\mathbf{E}_{mic}$، در یک مقیاس اتمی سریعاً تغییر می‌کند و معادلات ماکسول زیر را برآورده می‌سازد :

$$div\ \mathbf{E}_{mic} = \rho_{mic}/\varepsilon_0 \qquad , \qquad curl\ \mathbf{E}_{mic} = 0 \qquad \text{(ب-۲۱)}$$

که در آن ρ_{mic} چگالی بار میکروسکوپی است. $\mathbf{E}_{mac}$ متوسط $\mathbf{E}_{mic}$ روی ناحیه‌ای است که اتمهای بسیاری را در برمی‌گیرد و از این رو در معادلات زیر صدق می‌کند:

(ب-۲۲)
$$curl\ \mathbf{E}_{mac} = 0 \qquad , \qquad div\ \mathbf{E}_{mac} = \rho_{ave}/\varepsilon_0$$

که در آن ρ_{ave} متوسط ρ_{mic} است.

برای قطبش یکنواخت، نواحی مثبت و منفی دوقطبیها، سهمهایی با بزرگی یکسان، ولی علامت مخالف، در ρ_{ave} دارند، به جز در سطح نمونه، که در آنجا یک چگالی بار سطحی برابر با ناپیوستگی در مؤلفهٔ $\mathbf{P}$ عمود بر سطح وجود داود (فصل دوم کتاب گرانت و فیلیپس را ببینید). بنابراین میدان $\mathbf{E}_{mac}$ را می‌توان به این صورت نوشت

(ب-۲۳)
$$\mathbf{E}_{mac} = \mathbf{E}_e + \mathbf{E}_1$$

که در آن $\mathbf{E}_1$ سهم حاصل از این بار سطحی است. میدان $\mathbf{D}_{mac}$ با $\mathbf{D}_{mac} = \varepsilon_0\,\mathbf{E}_{mac} + \mathbf{P}$ تعریف می‌شود. اختلاف عمده‌ای بین موردهای الکتریکی و مغناطیسی پدید می‌آید زیرا مؤلفهٔ $\mathbf{P}$ که بر سطح عمود است چگالی بار سطحی را تعیین می‌کند در حالی که مؤلفهٔ $\mathbf{M}$ که **موازی** سطح است چگالی جریان سطحی را مشخص می‌کند. در مورد سه هندسهٔ مهم نمونه‌ها که در بالا بحث شد، به نتایج زیر می‌رسیم.

استوانه طویل موازی با میدان اعمال شده

ρ_{ave} فقط در دو انتهای استوانه غیر صفر است. از این رو

(ب-۲۴)
$$\mathbf{D}_{mac} = \varepsilon_0\,\mathbf{E}_e + \mathbf{P} \qquad , \qquad \mathbf{E}_{mac} = \mathbf{E}_e \qquad , \qquad \mathbf{E}_1 = 0$$

قرص نازک عمود بر میدان اعمال شده

$\mathbf{E}_1$ میدان درون خازن با تیغه‌های موازی است که بار $\mathbf{P}$ به ازای واحد سطح روی تیغه‌های آن توزیع شده است (توجه کنید که $\mathbf{E}_1$ در جهت خلاف $\mathbf{P}$ است)

(ب-۲۵)
$$\mathbf{D}_{mac} = \varepsilon_0\,\mathbf{E}_e \qquad , \qquad \mathbf{E}_{mac} = \mathbf{E}_e - \mathbf{P}/\varepsilon_0 \qquad , \qquad \mathbf{E}_1 = -\mathbf{P}/\varepsilon_0$$

کره

استفاده از قانون کولن برای محاسبهٔ مؤلفهٔ میدان موازی با $\mathbf{P}$، که ناشی از بار $p\cos\theta$ به ازای واحد سطح روی عنصر بین $\theta, \theta + d\theta$ در شکل ب - ۲ است، چنین به دست می‌دهد

(ب-۲۶)
$$\mathbf{E}_1 = -\int_0^{\pi} \frac{\mathbf{P}\ \cos\theta}{4\pi\varepsilon_0 R^2}\ (\cos\theta)\, 2\pi R^2 \sin\theta\, d\theta = -\frac{1}{3}\,\mathbf{P}/\varepsilon_0$$

که در آن، مثل قبل، از جایگزینی $c = \cos\theta$ استفاده کرده‌ایم. از این رو

$$\mathbf{E}_{mac} = \mathbf{E}_e - \frac{1}{3}\mathbf{P}/\varepsilon_0 , \qquad \mathbf{D}_{mac} = \varepsilon_0 \mathbf{E}_e + \frac{2}{3}\mathbf{P} \qquad \text{(ب-۲۷)}$$

$\mathbf{E}_1$ را **میدان واقطبنده** می‌نامند؛ در هر سه حالت بالا، این میدان را می‌توان به شکل $-N\mathbf{P}/\varepsilon_0$ نوشت، که در آن N **عامل واقطبنده** است. نتیجه می‌گیریم که N برای استوانهٔ طویل صفر، برای قرص نازک یک و برای کره $\frac{1}{3}$ است.

برای محاسبهٔ $\mathbf{E}_L$، یعنی مقدار $\mathbf{E}_{mic}$ در مرکز یک اتم، مثل مورد مغناطیسی با تقسیم ماده به ناحیه‌های "دور" و "نزدیک" که توسط یک سطح کروی کوچک از هم جدا می‌شوند، عمل می‌کنیم. با استفاده از تشابه با معادلهٔ (ب-۱۴) می‌توان نوشت

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{mac} + \mathbf{E}_2 + \mathbf{E}_3(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_4(\mathbf{r}) \qquad \text{(ب-۲۸)}$$

که در آن $\mathbf{E}_2$، $\mathbf{E}_3$ و $\mathbf{E}_4$ مشابه‌های سهمهای مغناطیسی متناظر هستند. مانند حالت مغناطیس $\mathbf{E}_4$ را کنار می‌گذاریم و فرض می‌کنیم که مقدار مناسب میدان برابر است با میدان در مرکز اتم، $\mathbf{r} = 0$ [1]، به نحوی که

$$\mathbf{E}_L = \mathbf{E}_{mac} + \mathbf{E}_2 + \mathbf{E}_3(0) \qquad \text{(ب-۲۹)}$$

با استفاده از محاسبهٔ بالا برای میدان حاصل از سطح کروی باردار [معادلهٔ (ب-۲۶)] نتیجه می‌گیریم که

$$\mathbf{E}_2 = +\frac{1}{3}\mathbf{P}/\varepsilon_0 \qquad \text{(ب-۳۰)}$$

$\mathbf{E}_3(0)$ نظیر $\mathbf{B}_3(0)$ برای ترتیب کاتوره‌ای دو قطبیهای اتمی و برای دوقطبیهای اتمی ناهم‌بسته، که با تقارن مکعبی نسبت به نقطهٔ تحت بررسی مرتب شده‌اند، صفر می‌شود. اگر $\mathbf{E}_3(0) = 0$، رابطهٔ میدان موضعی لورنتس

$$\mathbf{E}_L = \mathbf{E}_{mac} + \frac{1}{3}\mathbf{P}/\varepsilon_0 \qquad \text{(ب-۳۱)}$$

از معادلات (ب-۲۹) و (ب-۳۰) نتیجه می‌شود و مشابه الکتریکی معادلهٔ (ب-۲۰) است.

اگر از رهیافت قدیمی‌تر در مورد محیطهای مغناطیسی استفاده شود، که در آن اثرهای مغناطش به وسیلهٔ چگالی قطبهای مغناطیسی تخیلی روی سطح نمونه و برابر با ناپیوستگی در

۱- مانند مورد مغناطیسی می‌توانیم میدان الکتریکی را، به صورت یک سری تیلور، حول مکان هسته بسط دهیم. جفتیدگی بین شیب میدان الکتریکی و گشتاور چهار قطبی الکتریکی اتم، مثلاً برای الکترونهای f، مهم است، زیرا گشتاور چهار قطبی مربوط به یک تابع موج f غیر صفر است. بنابراین سمتگیری چنین تابع موجی، همانند جفتیدگی گشتاور دو قطبی مغناطیسی با میدان مغناطیسی، توسط این جفتیدگی مشخص می‌شود.

مؤلفهٔ **قائم** M تعیین می‌شوند، شباهت از این هم بیشتری بین حالتهای الکتریکی و مغناطیسی محرز می‌شود. دراین رهیافت برای تمام معادلاتی، که در مورد الکتریکی به دست آوردیم، با تعویضهای $\mathbf{E} \to \mathbf{H}$، $\mathbf{D} \to \mathbf{B}$، $\mathbf{P} \to \mu_0 \mathbf{M}$، $\varepsilon_0 \to \mu_0$ و $(\rho \to \mu_0 \rho)$ معادلهای مغناطیسی حاصل می‌شوند. این نکته را به این دلیل ذکر می‌کنیم که توضیح می‌دهد چرا خواننده ممکن است با مفهوم **میدان وامغناطنده** در ارتباط با میدان مغناطیسی درون ماده مواجه شود؛ این میدان $\mathbf{H}_1$ حاصل از چگالی قطب مغناطیسی تخیلی روی سطح نمونه است. در هر هندسه در عامل وامغناطنده همان مقادیر عامل واقطبنده را دارد. لازم است خوانندگان خود را متقاعد سازند، که این شق دیگر رهیافت همان جوابهای رهیافتی را می‌دهد، که در آن اثرهای مغناطش از جریانهای سطحی حاصل می‌شود.

پیوست (ج)
مکانیک کوانتومی الکترون در میدان مغناطیسی

براساس مکانیک کلاسیکی اندازه حرکت همیوغ بردار سرعت $\mathbf{v}$ ی یک ذره با معادلهٔ (۷-۲۵) بیان می‌شود. از این رو برای یک الکترون، داریم

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} - e\mathbf{A} \tag{ج-۱}$$

گذار از مکانیک کلاسیکی به مکانیک کوانتومی با درج عملگر $-i\hbar\nabla$ به جای اندازه حرکت $\mathbf{p}$ انجام می‌شود. بنابراین عملگر $\widehat{K}$ برای انرژی جنبشی به شرح زیر به دست می‌آید:

$$\frac{1}{2} mv^2 \rightarrow \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 \rightarrow \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2 = \widehat{K} \tag{ج-۲}$$

از بسط پرانتز و با یادآوردی اینکه $div\,\mathbf{A} = 0$ داریم

$$\widehat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{e}{m} \mathbf{A}.(-i\hbar\nabla) + \frac{e^2 A^2}{2m} \tag{ج-۳}$$

وقتی میدان مغناطیسی یکنواخت باشد، به خواننده واگذار می‌شود تا بیازماید که پتانسیل برداری $\mathbf{A}$، که در $\mathbf{B} = curl\,\mathbf{A}$ و $div\,\mathbf{A} = 0$ صدق می‌کند، عبارت است از

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2}\, \mathbf{r} \times \mathbf{B} \tag{ج-۴}$$

استفاده از این رابطه جملهٔ دوم در عبارت $\widehat{K}$ را به این صورت در می‌آورد

$$-\frac{e}{2m}(\mathbf{r}\times\mathbf{B}).(-i\hbar\nabla)=\frac{e}{2m}\mathbf{B}.[\mathbf{r}\times(-i\hbar\nabla)]$$

عملگر $(\mathbf{r}\times(-i\hbar\nabla))(\equiv\mathbf{r}\times\mathbf{p})$ عملگر $\hbar\mathbf{l}$ برای اندازه حرکت زاویه‌ای مداری الکترون است و در نتیجه انرژی جنبشی (ج-۳) در میدانی یکنواخت عبارت است از

$$\hat{K}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\mu_B\ \mathbf{B}.\mathbf{l}+\frac{e^2A^2}{2m} \tag{ج-۵}$$

که در آن $\mu_B=e\hbar/2m$ مگنتون بور است.

اولین جمله در $\hat{K}$ انرژی جنبشی در غیاب میدان است. با استفاده از معادلهٔ (۷-۴)، $-\mu_B\ \mathbf{l}$ گشتاور مغناطیسی حاصل از اندازه حرکت زاویه‌ای مداری است؛ از این رو دومین جمله در $\hat{K}$ سهم اندازه حرکت زاویه‌ای مدار الکترون در قسمت H_p [معادلهٔ (۷-۸)] از هامیلتونی است که مسئول پارامغناطیس است. سومین جمله مسئول دیامغناطیس القایی است که در بخش ۷-۳ مورد بحث قرار گرفت. سهم الکترون در پذیرفتاری دیامغناطیسی معادلهٔ (۷-۳۹) را می‌توان با محاسبهٔ مقدار چشمداشتی سومین جمله و با به‌کارگیری معادلهٔ (ج-۴) محاسبه کرد؛ بنابراین

$$<H_D>\left\langle\frac{e^2A^2}{2m}\right\rangle=\frac{e^2B^2}{8m}<\rho^2>\Bigg)\Bigg| \tag{ج-۶}$$

که در آن $<\rho^2>$ فاصلهٔ میانگین مربعی الکترون از محور z است. پس سهم $\delta\mu$ی الکترون در مغناطش از $\delta\mu=-d<H_D>/dB$ به دست می‌آید، که برای χ، جوابی همانند جواب رهیافت دیگر به کار رفته در بخش ۷-۳، به دست می‌دهد.

سهم الکترون در چگالی جریان الکتریکی به وسیلهٔ مقدار چشمداشتی $-e\mathbf{v}=-(\mathbf{p}+e\mathbf{A})/m$، یعنی به وسیلهٔ انتگرال زیر بیان می‌شود:

$$-\int\frac{e}{2m}[\psi^*(-i\hbar\nabla+e\mathbf{A})\psi+\text{همیوغ مختلط}\ ])dV \tag{ج-۷}$$

که در آن میانگین مقدار چشمداشتی و همیوغ مختلط آن را انتخاب کرده‌ایم تا مطمئن شویم که انتگرالده حقیقی است. انتگرالده را می‌توان به عنوان چگالی جریان موضعی $\mathbf{j}$ مربوط به تابع موج ψ تعبیر کرد. از این رو داریم

$$\mathbf{j}=\frac{ie\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)-\frac{e^2}{m}\mathbf{A}\psi^*\psi \tag{ج-۸}$$

این تعبیر در کتابهای مکانیک کوانتومی مورد تأیید قرار می‌گیرد. در آن کتابها نشان داده می‌شود که این برابر چگالی جریان لازم برای برآورده شدن پایستگی احتمال است که در آن ψ در معادلهٔ وابسته به زمان شرودینگر $\hat{K}\psi=i\hbar\partial\psi/\partial t$ صدق می‌کند و $\hat{K}$ با معادلهٔ (ج-۲) بیان می‌شود.

حقیقت ارزشمندترین چیزی است که در اختیار داریم. پس بیایید آن را اقتصادی کنیم.
(مارک تواین)

پیوست (د)
انرژی تبادل

از نظریهٔ اختلال مرتبهٔ اول استفاده می‌کنیم و اثر برهم‌کنش کولنی بین دو الکترون را محاسبه می‌کنیم. هدف آن است نشان دهیم که، گرچه برهم کنش کولنی به صراحت به اسپین الکترون بستگی ندارد، ولی انرژی دو الکترون به اسپین نسبی آنها وابسته است. هامیلتونی مختل نشده به شکل زیر است:

$$H = -(\hbar^{۲} / ۲m)(\nabla_{۱}^{۲} + \nabla_{۲}^{۲}) + V(\mathbf{r}_{۱}) + V(\mathbf{r}_{۲}) \qquad \text{(د-۱)}$$

که در آن $\nabla_{۱}$ و $\nabla_{۲}$ نشانگر عملیات مشتق‌گیری نسبت به مکانهای $\mathbf{r}_{۱}$ و $\mathbf{r}_{۲}$ دو الکترون هستند. انرژی پتانسیل V می‌تواند همان انرژی پتانسیل یک تک اتم، گروهی از اتمها یا پتانسیل دوره‌ای یک شبکهٔ بلور باشد.

حالت مختل‌نشده را حالتی برخواهیم گزید که در آن الکترونها حالتهای $\psi_a(\mathbf{r})$ و $\psi_b(\mathbf{r})$ هامیلتونی مختل نشده را اشغال کنند. از این رو $\psi_a(\mathbf{r})$ و $\psi_b(\mathbf{r})$ در معادلات زیر صدق می‌کنند.

$$\left(-\frac{\hbar^{۲}}{۲m}\nabla^{۲} + V(\mathbf{r})\right)\psi_a(\mathbf{r}) = E_a\psi_a(\mathbf{r})$$
$$\text{(د-۲)}$$
$$\left(-\frac{\hbar^{۲}}{۲m}\nabla^{۲} + V(\mathbf{r})\right)\psi_b(\mathbf{r}) = E_b\psi_b(\mathbf{r})$$

برای یک پتانسیل اتمی، حالتهای ψ_a و ψ_b ویژه حالتهای تک ذره‌ای هستند؛ در مورد پتانسیل

دوره‌ای این حالتها، حالتهای بلوخ‌اند (فصل ۱۱ را ببینید). اگر اسپین الکترونها را نیز به حساب آوریم، هامیلتونی مختل نشده چهار حالت **تبهگن** با انرژی $E_a + E_b$ دارد. چهار تابع موج کاملاً پادمتقارن[1] متناظر با این انرژی، که برای انجام محاسبهٔ اختلال مرتبهٔ اول انرژی کولنی مناسب هستند، عبارتند از

$$\Psi_S = \frac{1}{2}\,[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) + \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)][\alpha(S_1)\beta(S_2) - \alpha(S_2)\beta(S_1)]$$

$$\Psi_{T1} = (1/\sqrt{2})\,[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)]\alpha(S_1)\alpha(S_2)$$

$$\Psi_{T2} = \frac{1}{2}\,[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)]\alpha(S_1)\beta(S_2) + \alpha(S_2)\beta(S_1)] \qquad (\text{د-}۳)$$

$$\Psi_{T3} = (1/\sqrt{2})\,[\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)]\beta(S_1)\beta(S_2)$$

که در آن S_1 و S_2 متغیرهای اسپینی الکترونها و α و β ویژه حالتهای اسپینی به ترتیب، با $S_z = +\frac{1}{2}$ و $S_z = -\frac{1}{2}$ هستند. حالت مختل نشده ψ_s حاصل ضرب یک تابع فضایی متقارن در تابع موج یگانهٔ اسپینی پاد متقارن ($S=0$) است و بنابراین متناظر است با اسپینهای "پادموازی" برای دو الکترون. سه حالت دیگر شامل حاصل ضربهای یک تابع موج فضایی پادمتقارن در سه تابع موج سه‌گانه اسپین متقارن ($S=1$)، به ترتیب با $S_z = +1$، ۰ و ۱−، هستند؛ این حالتهایی هستند که برای آنها اسپین الکترونها "موازی" اند. توجه کنید که این سه تابع موج برای $\psi_a = \psi_b$ صفر می‌شوند. به نحوی که، مطابق اصل پائولی، دو الکترون تنها در صورتی بتوانند حالت یکسانی را اشغال کنند که اسپینهای مخالف هم داشته باشند.

شاید در اینجا ارزشمند باشد که اندکی از موضوع منحرف شویم و به این نکته اشاره کنیم که چرا حالتهای بالا برای محاسبهٔ اختلال مناسب هستند. به دلیل برهم کنشی کولنی، انرژی حالت یگانه با انرژی سه حالت سه‌گانه اختلاف دارد. وقتی اختلال H' تبهگنی دو حالت مختل نشده را از بین ببرد، تفکیک حالتها را فقط با استفاده از دو ترکیب خطی، ψ_1 و ψ_2، از آن حالتهایی که در $\int \psi_1^* H' \psi_2 d\tau = 0$ صدق می‌کنند، می‌توان به درستی محاسبه کرد، که در آن عنصر حجم $d\tau$، در حالت کلی، علاوه بر انتگرالگیری روی متغیر فضایی، مجموعیابی روی متغیرهای اسپینی را نیز در برمی‌گیرد. محاسبهٔ صریح نشان می‌دهد که برای $i = 1$، ۲ یا ۳

$$\sum_{S_1, S_2} \int d\mathbf{r}_1 \int dr_2 \Psi_s^* \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \mid \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \mid} \Psi_{Ti} = 0 .$$

---

[1] - توجه کنید که توابع موج باید تحت تعویض همزمان هر دو مختصات فضایی واسپین، یعنی $\mathbf{r}_1$ و $\mathbf{S}_1 \to \mathbf{r}_2$ و $\mathbf{S}_2$، پادمتقارن باشند.

در نتیجه شرط لازم برای هر یک از حالتهای سه گانه برقرار است. مثالی از دو حالت مختل نشدهٔ پاد متقارن با انرژی E_a+E_b، که نامناسب هستند عبارت است از

$$\Psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\ [\psi_a(\mathbf{r}_1)\alpha(S_1)\psi_b(\mathbf{r}_2)\beta(S_2)-\psi_a(\mathbf{r}_2)\alpha(S_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)\beta(S_1)]$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\ (\psi_S+\psi_{T2})$$

و

$$\Psi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\ [\psi_a(\mathbf{r}_1)\beta(S_1)\psi_b(\mathbf{r}_2)\alpha(S_2)-\psi_a(\mathbf{r}_2)\beta(S_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)\alpha(S_1)]$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\ (-\psi_S+\psi_{T2})$$

مقدار چشمداشتی برهم کنشی کولنی فقط به قسمت فضایی تابع موج بستگی دارد. برای هر یک از سه حالت سه گانه، جابه‌جایی انرژی عبارت است از

$$\Delta E_T=\sum_{S_1,S_2}\int d\mathbf{r}_1\int d\mathbf{r}_2\Psi^*_{Ti}\ \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\ |\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\ \Psi_{Ti}\ ,\qquad i=1,2,3$$
$$=E_1-J \tag{د-۴}$$

که در آن

$$E_1=\int d\mathbf{r}_1\int d\mathbf{r}_2\ |\psi_a(\mathbf{r}_1)|^2\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\ |\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\ |\psi_b(\mathbf{r}_2)|^2 \tag{د-۵}$$

سهم "واضح" حاصل‌ازچگالی بار $-e\ |\psi_a(\mathbf{r}_1)|^2$ است، که با چگالی‌بار $-e\ |\psi_b(\mathbf{r}_2)|^2$ برهم کنش می‌کند و

$$J=\int d\mathbf{r}_1\int d\mathbf{r}_2\psi^*_a\ (\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_1)\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\ |\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\psi^*_b(\mathbf{r}_2)\psi_a(\mathbf{r}_2) \tag{د-۶}$$

سهم تبادل است. گرایش J به مثبت بودن را می‌توان با بررسی انتگرالده در ناحیهٔ $\mathbf{r}_1\sim\mathbf{r}_2$، که در آنجا برهم کنش کولنی بزرگ است، مشاهده کرد. وقتی $\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_2$، دیده می‌شود که حاصل‌ضرب چهار تابع موج در معادلهٔ (د-۶) برابر $|\psi_a(\mathbf{r}_1)|^2\ |\psi_b(\mathbf{r}_1)|^2$ می‌شود و در نتیجه انتگرالده در این حد به مقداری مثبت می‌گراید. مقدار چشمداشتی برهم‌کنش کولنی درحالت یگانه عبارت است از

$$\Delta E_S=\sum_{S_1,S_2}\int d\mathbf{r}_1\int d\mathbf{r}_2\Psi^*_S\ \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\ |\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\ \Psi_s=E_1+J \tag{د-۷}$$

لذا اختلاف انرژی بین حالت با اسپینهای موازی و حالت با اسپینهای پادموازی چنین است

$$\Delta E_T - \Delta E_S = -2J \quad \text{(د-۸)}$$

توجه کنید که، برای اینکه سهم تبادل [معادلهٔ (د-۶)] در انرژی از اهمیت برخوردار باشد، لازم است که ناحیه‌ای از فضا وجود داشته باشد که در آن $\psi_a^*(\mathbf{r})\psi_b(\mathbf{r})$ قابل ملاحظه باشد. این مستلزم آن است که همپوشانی قابل ملاحظه‌ای بین توابع موج $\psi_a(\mathbf{r})$ و $\psi_b(\mathbf{r})$ وجود داشته باشد. ماهیت به شدت جایگزیدهٔ توابع موج $4f$ در اتمهای خاکی کمیاب توضیح می‌دهد که چرا انرژی برهم کنش تبادل مستقیم کوچکی بین اتمهای خاکی کمیاب همسایه وجود دارد. ولی همپوشانی، برای دو تابع موج $4f$ روی یک اتم، که در آن انرژیهای تبادل مسئول اولین قاعدهٔ هوند هستند، بزرگ است.

کتابشناسی

مطالعات زمینه

1- *B. H. Flowers and E. Mendoza, Properties of Matter, Wiley, London, 1970.*

(این کتاب شرح خوبی از دیدگاه اتمی پایهٔ ماده همراه با بحث پتانسیلهای بین اتمی و نظریه جنبشی را در بردارد.)

2- *F. Mandl, Statisitical Physics (2nd edn), Wiley, London, 1988.*

(این کتاب شامل زمینهٔ مکانیک آماری و ترمودینامیک است).

3- *I. S. Grant and W. R. Philips, Electromangetism (2nd edn), Wiley, London, 1990.*

(زمینهٔ الکتریسیته و مغناطیس را فراهم می‌سازد)

4- *A. P. French and E. F. Taylor, An Introduction to Quantum Physics, Van Nostrand Reinhold , London, 1979.*

(زمینه در مکانیک کوانتومی)

5- *F. G. Smith and J. H. Thomson, Optics (2nd end). Wiley, London, 1988.*

(زمینه در اپتیک)

6- *R. P. Feynman, Lectures on Physics, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1965.*

(رهیافتی جالب برای فیزیک که جمعاً در سه جلد است؛ جلد ۳ شامل رهیافت مکانیک کوانتومی است که در فصل ۴ برمی‌گزینیم و به کار می‌بریم)

کتابهای برگزیده در فیزیک حالت جامد

7- *C. Kittel, Introduction to Solid State Physics (6th edn), Wiely , New York, 1986.*

(کتاب درسی استاندارد، پر از حقایق مفید:)

8- *H. P. Myers, Introductory Solid State Physics, Taylor and Francis, London, 1990.*

(از نظر سطح علمی همانند همین کتاب)

9- *H. M. Rosenberg, The Solid State (3rd edn), Oxford University Press, Oxford, 1988.*

(عمداً، کتابی کوتاهتر و ساده‌تر)

10- *G. Bruns, Solid State Physics, Academic Press, Orlando, Florida, 1985.*

(مفصل‌تر از این کتاب)

11- *N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Solid State Physics, Holt, Rinchart Winston, New York, 1976.*

(شاید بهترین کتاب درسی برای استفاده برای طرز کار پیشرفته‌تر و مفصل‌تر)

12- *J. M. Ziman, Principles of the Theory of Solids, Cambridge University Press, Cambridge, 1964.*

(کتاب خوب، ولی اکنون مقدمه‌ای قدری قدیمی برای روشهای نظری پیشرفته‌تر است)

13- *R. Dalven, Introduction to Applied Solid State Physics (2nd edn). Plenum, New York, 1990.*

(کاربردهایی که شامل نیمرساناها، ابررساناها، فرومغناطیس‌ها و اپتیک غیرخطی است)

14- *L. Solymar and D. Walsh, Lectures on the Electrical Properties of Materials (3rd edn), Clarendon Press, Oxford, 1984.*

(مطالب فصل‌های ۳، ۴، ۵، ۶، ۹ و ۱۰ در این کتاب را در بردارد)

مطالعات بیشتر در بارهٔ موضوعهای ویژه

منابع داده شده در متن کتاب را نیز ملاحظه کنید

فصل ۱

15- *P. J. Brown and J. D. Forsyth, The Crystal Structure of Solids, Edward Arnold, London, 1973.*

(جزئیات بیشتر بلورشناسی را در سطحی ساده‌تر در بردارد.)

16- *R. C. Evans, Crystal Chemistry (2nd edn), Cambridge University Press, Cambridge, 1966.*

(یک توجیه عالی در مورد رابطهٔ بین پیوند شیمیایی و ساختار بلوری)

فصل ۲

17- *J. M. Ziman, Electrons and Phonons, , Clarendon Press, Oxford, 1960.*

(طرز عمل الکترونها و فونونها در جامدها و برهمکنش‌های آنها به طور کامل، جامع، سخت و ریاضی)

فصل ۵

18- R. A. Smith, Semiconductors (2nd edn), Cambridge University Press, Cambridge, 1978.

(بررسی جامع خواص نیمرساناها)

19- A. Van der Ziel, Solid State Physical Electronics (3rd edn), Prentice-Hall, Englewood Cliffs NJ. 1976.

(کتاب درسی جامع با گسترهٔ وسیع)

فصل ۶

20- D. A. Fraser, The Physics of Semicondutor Devices (4th edn), Clarendon Press, Oxford, 1986.

(گزارش سادهٔ ممتاز)

21- S. M. Sze, Semiconductor Devices: Physics and Technology, Wiley, New York, 1985.

(گزارش پیشرفته‌تر و مفصل‌تر)

همچنین مرجع ۱۹ را برای گزارش در مورد رفتار قطعات نیمرسانا ببینید.

۲۲- مجلهٔ اکتبر ۱۹۸۶ از *Physics Today* شامل مقالاتی در مورد دانش *VLSI* (مجتمع در مقیاس بسیار بزرگ) است.

۲۳- مجلهٔ فوریهٔ ۱۹۹۰ از *Physics Today* شامل مقالاتی درباره قطعات نیمرسانای در مقیاس نانومتری و فوق‌العاده سریع است.

فصل ۷

24- B. I. Bleaney and B. Bleaney, Electricity and Magnetism (3rd edn), Clarendon Press, Oxford, 1976.

(یک گزارش مقدماتی خوب از خواص مغناطیس مواد)

فصل ۸

25- J. Crangle, The Magnetic Properties of Solids, Edward Arnold, London, 1977.

(جزئیات بیشتر دربارهٔ نظم مغناطیسی در جامدها در یک سطح مناسب.)

فصل ۹

26- H. Frohlich, Theory of Dielectrics (2nd edn) , Clarendon Press Oxford, 1985.

(رهیافت مفصل و بسیار دقیق)

27- J. H. van Vleck, The Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities, Oxford University Press, Oxford, 1932.

ولی تاکنون برای بارها تجدید چاپ شده است (کتاب درسی استاندارد برای محاسبهٔ کوانتومی ابر شبکه‌ها.)

فصل ۱۰

28- D. R. Tilley and J. Tilley, Superfluidity and Superconductivity (2nd edn), Adam Hilger, Bristol, 1986.

(برای جزئیات بیشتر و مقدمه‌ای بر موضوعهای پیشرفته‌تر)

29- P. G. Gennes, Superconductivity of Metals and Alloys, Benjamin. New York, 1966.

(شاید بهترین کتاب تمرین برای یادگیری نظریه ابررسانایی)

30- T. van Duzer and C. W. Turner, Principles of Superconductive Derices and Circuits, Elsevier, New York, 1981.

(گزارش خوبی در مورد کاربردها)

فصل ۱۱

31- L. Brillouin, Wave Propagation in Periodic Structures, Dover, New York, 1953.

(یک گزارش خواندنی ممتاز توسط مخترع موضوع)

فصل ۱۲

32- H. A. Hauptman, "The phase problem of x-ray crystallography", in Physics Today, November 1989, p.24.

(بحث در مورد مسئلهٔ استنتاج ساختاز از نقشهٔ پراش)

33- G. E. Bacon, Neutron Diffraction (3rd edn), Clarendon Press, Oxford, 1975.

(کتاب درسی جامع)

فصل ۱۳

34- A. B. Pippard, The Dynamics of Conduction Electrons, Blackie, London, 1965.

(نمایش زیبای رابطهٔ بین دینامیک الکترون رسانشی و هندسهٔ سطح فرمی.)

فصل ۱۴

35- B. I. Halperin, 'The quantized Hall effect,' in Scientific American, April 1986, p.40.

(اثر کوانتومی هال بدون معادلات!)

مرجع ۲۳ را برای بحث بیشتر در مورد تونل‌زنی تشدیدی و قطعات کوانتومی دیگر ببینید.

جدول ثابتها

کمیت	علامت	مقدار	واحدها
بارالکترون	e	$۱/۶۰۲ \times ۱۰^{-۱۹}$	C
جرم الکترون	m	$۹/۱۰۹ \times ۱۰^{-۳۱}$	kg
جرم پروتون	m_p	$۱/۶۷۳ \times ۱۰^{-۲۷}$	kg
جرم نوترون	m_n	$۱/۶۷۵ \times ۱۰^{-۲۷}$	kg
واحد جرم اتمی	amu	$۱/۶۶۱ \times ۱۰^{-۲۷}$	kg
ثابت پلانک،	h	$۶/۶۲۶ \times ۱۰^{-۳۴}$	$J.S$
ثابت پلانک،	$\hbar = h/۲\pi$	$۱/۰۵۵ \times ۱۰^{-۳۴}$	$J.S$
شعاع بور	$a_\circ = \hbar^۲/me^۲$	$۵/۲۹۲ \times ۱۰^{-۱۱}$	m
مگنتون بور	$\mu_B = e\hbar/۲m$	$۹/۲۷۴ \times ۱۰^{-۲۴}$	$JT^{-۱}$
سرعت‌نور	c	$۲/۹۹۸ \times ۱۰^{۸}$	$ms^{-۱}$
تراوایی خلاء	$\mu_\circ$	$۴\pi \times ۱۰^{-۷}$	$Hm^{-۱}$
گذردهی خلاء	$\varepsilon_\circ = ۱/\mu_\circ c^۲$	$۸/۸۵۴ \times ۱۰^{-۱۲}$	$Fm^{-۱}$
عدد آواگادرو	N_A	$۶/۰۲۲ \times ۱۰^{۲۳}$	$mol^{-۱}$
ثابت بولتزمن	k_B	$۱/۳۸۱ \times ۱۰^{-۲۳}$	$JK^{-۱}$
ثابت گاز	$R = N_A k_B$	$۸/۳۱۵$	$JK^{-۱} mol^{-۱}$

واژه‌یاب